

К 200-летию Харьковского университета
Серия монографий и учебных пособий

В.В.Ульянов

СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ ПО КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Часть вторая



Харьков 2011

К 65-летию кафедры теоретической физики
имени академика И.М.Лифшица

В.В.Ульянов

**СБОРНИК ОБЗОРОВ И
СТАТЕЙ ПО КВАНТОВОЙ
ТЕОРИИ**

(с соавторами и без)

І І

**СПИНОВЫЕ СИСТЕМЫ
МЕТОД ЭФФЕКТИВНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ
КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ
ПАРАМАГНЕТИКИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ
СОЛИТОННЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ**

Харьков 2011

УДК 530.145

У 51

У 51 **Ульянов В.В.** Сборник обзоров и статей по квантовой теории (с соавторами и без). Часть II / В.В.Ульянов. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 106 с.

Сборник содержит несколько обзоров и статей, в которых затрагиваются различные вопросы квантовой теории.

Во вторую часть входят один обзор и статьи, посвященные новым методам квантовой теории спиновых систем и так называемым квазиточнорешаемым моделям, а также свойствам парамагнетиков в магнитном поле и солитонным потенциалам.

Сборник продолжает серию изданий, приуроченную к 200-летию Харьковского университета и 65-летию кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица.

Посвящается Льву Элеазаровичу Паргаманику – профессору кафедры теоретической физики, известному физику-теоретику, воспитавшему многих выдающихся специалистов.

Предназначен для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

Издается по решению кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица от 17 мая 2011 года (протокол № 11)

УДК 530.145

ПРЕДИСЛОВИЕ

В сборник включены некоторые обзоры и обзорные статьи, а также небольшие статьи, представляющие для автора особый интерес.

Большая часть этих публикаций написана совместно с моими коллегами по кафедре теоретической физики.

Вторая часть содержит один обзор и статьи. Они обобщают результаты наших работ 1980-х годов по развитию новых методов исследования так называемых спиновых систем и обнаружению новых классов точных решений уравнения Шредингера, получивших название квазиточнорешаемых моделей, с помощью развитого *метода эффективных потенциалов*. Общие теоретические положения сопровождаются приложениями к конкретным спиновым системам.

Сборник посвящается Льву Элеазаровичу Паргаманику – профессору кафедры теоретической физики, известному физику-теоретику, воспитавшему многих выдающихся специалистов.

Предназначен для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

На последней странице помещены изображения обложек физических журналов, в которых публиковались обзоры и статьи из данного сборника.

Благодарю Александра Михайловича Ермолаева за внимательное отношение к работам автора, за постоянную помощь советами и редкой литературой.



ISSN 0132-6414

Физика низких температур

Специальный выпуск,
посвященный памяти И. М. Лифшица

Под редакцией В. Д. Нацика

**Том 23
Выпуск 1
1997**

Новые точные решения уравнения Шредингера с потенциалами спинового и солитонного происхождения

В. В. Ульянов, О. Б. Заславский, Ю. В. Василевская

Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

Статья поступила в редакцию 24 июня 1996 г.

Рассматриваются новые классы точных решений уравнения Шредингера с простыми явными аналитическими выражениями для потенциальных полей, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний. Они обнаружены с помощью оригинальных методов, разработанных в квантовой теории спиновых систем. Соответствующие эффективные потенциалы сопоставляются с аналогичными моделями солитонного происхождения. Основное внимание уделено необычным явлениям (квазиточнорешаемость, гибкость и многопрофильность моделей потенциалов, экстремумы четвертого порядка, конечнозонность и структурные превращения в зонах, спин-солитонная аналогия).

Розглядаються нові класи точних розв'язків рівняння Шредінгера з простими явними аналітичними виразами для потенціальних полів, рівнів енергії та хвильових функцій стаціонарних станів. Вони виявлені за допомогою оригінальних методів, розроблених у квантовій теорії спінових систем. Відповідні ефективні потенціали зіставляються з аналогічними моделями солітонного походження. Основну увагу приділено незвичайним явищам (квазиточнорозв'язуваність, гнучкість та багатопрофільність моделей потенціалів, екстремуми четвертого порядку, скінченнозонність та структурні перетворення у зонах, спин-солітонна аналогія).

PACS: 03.65.-w

1. Введение

*Найдены точные решения этих уравнений ...
Чтобы дальнейшие соображения были более
ясными, мы остановимся на этом вопросе
несколько подробнее ...*

И. М. Лифшиц

В квантовой теории проблема точных решений уравнения Шредингера для стационарных состояний частицы в потенциальном поле постоянно привлекает внимание специалистов. Еще сравнительно недавно насчитывалось всего несколько примеров потенциалов, допускавших простое точное решение. Ситуация изменилась после разработки метода обратной задачи рассеяния (ОЗР) в теории солитонов [3]. Наконец, существенный прорыв в проблеме точных решений уравнения Шредингера связан с развитием оригинальных методов в теории спиновых систем [4], когда удалось открыть сразу много новых классов точных решений, а также указать пути поисков таких решений. Добавим также, что точные решения уравнения Шрединге-

ра, особенно с простыми явными выражениями для потенциалов, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний, вообще образуют незабываемый «золотой» фонд квантовой теории.

Совершенно естественно, что обращение к вопросам точных решений вызывает постоянный интерес. Можно выделить три периода интенсивного появления новых моделей с точными решениями.

А начиналось все во время становления квантовой механики, когда в середине и конце 20-х годов появились первые модели с точными решениями с простыми выражениями для потенциалов, уровней энергии и волновых функций стационарных состояний — гармонический осциллятор, кулоновское поле, потенциалы Морса, Эккарта, Пешля—Теллера, бесконечная прямоугольная яма, дельта-яма.

Затем наступило время различных обобщений, усложнений, композиций из разных моделей [5, 6]. Процесс поисков новых моделей с точными решениями продолжался, но его плоды оказывались либо слишком сложными, громоздкими, либо очень абстрактными.

* Эпиграфы к разделам статьи взяты из работ И. М. Лифшица [1,2].

Первый прорыв в область новых простых моделей с точными решениями связан с развитием теории солитонов, поскольку в ситуации ОЗР солитонные формирования играют роль потенциальных полей в стационарном уравнении Шредингера для некоторой квантовой частицы (псевдочастицы). Особенность таких солитонных точных решений состоит в том, что уровни энергии оказываются фиксированными (они являются интегралами движения нелинейного эволюционного уравнения Кортевега—де Фриза [3]) при достаточно большой гибкости потенциалов, а состояния непрерывного спектра соответствуют полной прозрачности при рассеянии частиц.

Другое направление связано с обнаружением принципиально нового объекта в квантовой механике — квазиточнорешаемых моделей. Здесь моментом прозрения стало нахождение целых классов новых моделей с точными решениями в связи с разработкой новых методов в теории спиновых систем [7]. Для спиновых систем в соответствующих эффективных потенциальных полях с точными решениями уравнения Шредингера в зависимости от выбора спинового параметра и значений магнитного поля получаются разнообразные профили потенциалов и имеются простые формулы для энергетического спектра и соответствующих волновых функций [4].

Эти два новых направления внесли весомый вклад в сокровищницу задач, допускающих точное решение.

В дальнейшем изучение квазиточнорешаемых моделей развилось в новую область математики и математической физики (см. [8,9] и указанную там литературу), однако в данной статье мы сосредоточимся только на физических аспектах (причем лишь некоторых).

В чем же конкретно заключается важность точных решений рассматриваемого типа?

Во-первых, следует подчеркнуть, что это основа стационарных состояний в квантовой механике (см., например, [10–14]). Далее нужно отметить, что точные решения являются фундаментом новых задач. Затем нельзя не упомянуть о значении точных решений как базы приближенных методов. Добавим, что модели с точными решениями часто используются при изучении сложных явлений, когда точные закономерности не известны или когда можно изучить основные свойства, не зависящие от конкретного вида потенциала, отвлекаясь от усложнений, вносимых его деталями. Так, И. М. Лифшиц в работах по теории локальных возмущений [1] часто использовал так называемую сепарабельную модель возмущения. Укажем так-

же, что проверка новых теорий обычно осуществляется на основе известных частных случаев задач с точными решениями. Еще одна важная роль — задачи с точными решениями служат тестовыми примерами при применении численных методов.

Можно надеяться, что тема точных решений сохранит живой интерес и для будущих времен.

2. Спиновые эффективные потенциалы

Как правило, изучать дифференциальные уравнения значительно легче, чем их дискретные аналоги...

И. М. Лифшиц

Спиновые системы — особый класс квантовых систем, гамильтониан которых содержит операторы спина (эффективного спина, псевдоспина и т.п.). Они встречаются во многих областях физики (магнетизм и сверхпроводимость, ядерная физика и взаимодействие света и вещества). Для описания этих систем необходимы специальные методы теоретической физики, поскольку соотношения коммутации для компонент спина отличаются от бозевских и фермиевских. Широкое распространение получили методы для многочастичных систем, а системы с односпиновым гамильтонианом оставались без внимания. В качестве примера можно указать так называемые анизотропные парамагнетики. Это касается и многочастичных систем, так как в некоторых случаях коллективные степени свободы одночастичного вида описывают движение системы как целого [4].

Спин представляет собой квантовомеханический объект существенно дискретной природы. Поэтому, например, уравнение, возникающее при изучении энергетического спектра спиновых систем, имеет матричную форму. При больших значениях спина это затрудняет анализ свойств системы стандартными квантовомеханическими методами. Оказывается, однако, что для достаточно широкого класса спиновых систем можно ввести строгое потенциальное описание, так что энергетический спектр спиновой системы совпадает с некоторыми уровнями энергии для псевдочастицы, движущейся в потенциальном поле достаточно простой формы. Такое точное спин-координатное соответствие служит также основой развития различных приближенных методов описания спиновых систем, например теории возмущений и квазиклассического приближения. Особенно важно, что для соответствующей координатной системы это приводит к нахождению новых точных решений уравнения Шредингера [4].

Предложенный нами подход заключается в том, что рассматриваются гамильтонианы, построенные из генераторов некоторой группы Ли (в частности, спиновых операторов), и при решении задачи об их собственных значениях и собственных векторах используется представление обобщенных [15] (в частности, спиновых) когерентных состояний. В получающемся координатном представлении такой гамильтониан становится дифференциальным оператором, в частности оператором Шредингера с некоторой эффективной потенциальной энергией. Найденные потенциалы для простых спиновых систем либо имеют форму нелокализованных ям, либо оказываются периодическими. Во всех случаях имеются как симметричные, так и несимметричные разнообразные многопараметрические потенциальные модели.

Переходя к конкретным примерам, рассмотрим прежде всего один из наиболее простых спин-гамильтонианов (здесь и далее без ограничения общности мы пользуемся безразмерными величинами), соответствующий так называемому легкоосному парамагнетизму в перпендикулярном магнитном поле [7]:

$$H = -S_y^2 - BS_x. \quad (1)$$

Здесь S_j — операторы проекций спина; B пропорционально внешнему магнитному полю. Если мы решаем задачу нахождения стационарных состояний такой системы с помощью указанного метода, то приходим к стандартному одномерному уравнению Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + [E - U_{\text{eff}}(\xi)]\psi = 0 \quad (2)$$

для псевдочастицы с квадратичным законом дисперсии (спинона), движущейся в эффективном потенциальном поле, построенном из гиперболических функций

$$U_{\text{eff}}(\xi) = \frac{B^2}{4} \text{sh}^2 \xi - B(S + 1/2) \text{ch} \xi, \quad (3)$$

где S — величина спина, а ξ можно считать некоторой безразмерной координатой. При этом оказывается [4], что собственные значения энергии E спиновой системы (1) совпадают с нижними $2S + 1$ уровнями энергии спинона в потенциальном поле (3).

На основании такого подхода к описанию спиновых систем были изучены низкотемпературные физические свойства (энергетический спектр, намагниченность, восприимчивость, спиновое туннелирование) анизотропных парамагнетиков [4, 7].

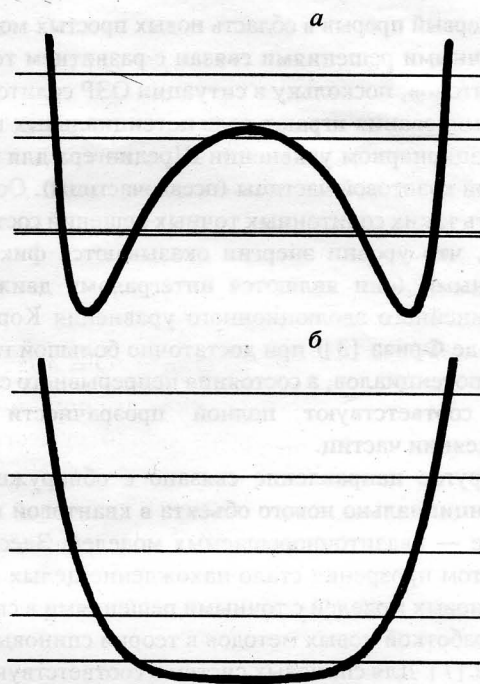


Рис. 1. Типичные эффективные потенциалы (3) при $S = 2$: яма с двумя минимумами для $B \ll B_0$ (а); яма с четверным минимумом для $B = B_0$ (б).

Для значений магнитного поля $B > B_0 = 2S + 1$ найденный нелокализованный потенциал (3) имеет форму одиночной ямы, тогда как для $B < B_0$ он превращается в яму с двумя минимумами (рис. 1, а). Важно, что для $B = B_0$ эта модель принимает форму ямы с минимумом четвертого порядка (рис. 1, б).

Если при больших значениях спина ($S \gg 1$) установленное спин-координатное соответствие удобно при изучении свойств спиновой системы [4] стандартными квантовомеханическими методами для уравнения Шредингера (2), то, с другой стороны, для небольших значений спина возможно нахождение собственных значений спин-гамильтониана (1) непосредственно в дискретном спиновом представлении как корней характеристического уравнения. С учетом свойств симметрии задачи получаются простые явные аналитические формулы для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний. Различные конкретные случаи рассмотрены в наших работах [4, 17, 18]. В настоящей работе сосредоточимся на особом случае точных решений для модели (3) при критическом значении параметра $B = B_0 = 2S + 1$, когда потенциал имеет форму ямы с минимумом четвертого порядка:

$$U_{\text{eff}}(\xi) = -\frac{B_0^2}{2} + B_0^2 \text{sh}^4 \xi/2. \quad (4)$$

Для дальнейшего удобно ввести новую координату $x = \xi/2$ и отсчитывать энергию от минимума потенциала (4). Тогда в новых переменных уравнение (1) принимает вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [\varepsilon - u(x)]\psi = 0, \quad (5)$$

где $\varepsilon = 4E + 2B_0^2$; $u(x) = Q \text{sh}^4 x$, $Q = 4B_0^2$. (6) Таким образом, точные решения для потенциального поля с четверным минимумом (6) существуют при значениях $Q = 4(2S + 1)^2$, где $S = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$. При этом, как уже отмечалось, для небольших значений параметра S должны получаться простые явные формулы для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний. Опуская расчетные детали, приведем некоторые из них (первые индексы энергий отвечают верхним знакам в формулах). Если $S = 0$, то для основного состояния

$$\varepsilon_0 = 2; \quad \psi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{1}{2} \text{ch } 2x\right).$$

Если $S = 1/2$, то к основному состоянию присоединяется первое возбужденное:

$$\varepsilon_0 = 3; \quad \psi_0(x) = A_0 \exp\left(-\text{ch } 2x\right) \text{ch } x;$$

$$\varepsilon_1 = 11; \quad \psi_1(x) = A_1 \exp\left(-\text{ch } 2x\right) \text{sh } x.$$

Если $S = 1$, то в формулах появляются радикалы:

$$\varepsilon_{0,2} = 16 \mp 2\sqrt{37};$$

$$\psi_{0,2}(x) = A_{0,2} \exp\left(-\frac{3}{2} \text{ch } 2x\right) \left(\text{ch } 2x \pm \frac{\sqrt{37} \mp 1}{6}\right);$$

$$\varepsilon_1 = 14; \quad \psi_1(x) = A_1 \exp\left(-\frac{3}{2} \text{ch } 2x\right) \text{sh } 2x.$$

Если $S = 3/2$, то для четырех состояний с низколежащими уровнями энергии

$$\varepsilon_{0,2} = 19 \mp 4\sqrt{13}; \quad \psi_{0,2}(x) = A_{0,2} \exp\left(-2 \text{ch } 2x\right) \left(\text{ch } 3x \pm \frac{\sqrt{13} \pm 1}{2} \text{ch } x\right);$$

$$\varepsilon_{1,3} = 35 \mp 4\sqrt{21}; \quad \psi_{1,3}(x) = A_{1,3} \exp\left(-2 \text{ch } 2x\right) \left(\text{sh } 3x \pm \frac{\sqrt{21} \mp 3}{2} \text{sh } x\right).$$

Если $S = 2$, то ограничимся только уровнями энергии. Они содержат не только радикалы:

$$\varepsilon_{2n} = \frac{130}{3} + \frac{8}{3} \sqrt{313} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{1765}{313^{3/2}} \right) + \varphi_n \right],$$

$$n = 0, 1, 2;$$

$$\varphi_{0,1} = \pm \frac{2}{3} \pi, \quad \varphi_2 = 0; \quad \varepsilon_{1,2} = 40 \mp 2\sqrt{109}.$$

Нормировочные величины связаны с модифицированными функциями Бесселя (функциями Макдональда): так, $A_0 = [K_0(1)]^{-1/2}$ в случае $S = 0$.

Подчеркнем, что в рассматриваемых моделях число точных решений оказывается конечным. Это свойство получило название «квазиточнорешаемости» [8]. При этом стационарные состояния с точными решениями (мультиплет $2S + 1$ уровней энергии) расположены в нижней части энергетического спектра, начиная с основного состояния, тогда как остальные стационарные состояния («надспиновые») не имеют точных решений.

Как известно, степенной потенциал $u(x) = Qx^4$ (четверной осциллятор) не допускает точных решений, являясь важным элементом многих существенно ангармонических систем [19]. Таким образом, возникает несколько парадоксальная ситуация, когда более простая модель 4-степенного потенциала не имеет точных решений, а более сложная (и близкая к ней как качественно, так и количественно) 4-гиперболическая модель (6) таковыми обладает. Сопоставление уровней энергии этих двух моделей показывает, что они сближаются с увеличением параметра S в (6), а относительная ошибка оказывается порядка $S^{-2/3}$.

Важно, что тем самым мы получаем еще один способ нахождения уровней энергии четверного осциллятора с помощью модели с точными решениями (6). В более общем случае то же касается смешанного квадратично-четверного осциллятора и модели с точными решениями (3).

Для рассмотренной системы со спин-гамильтонианом (1) можно также ввести описание на основе некоторой периодической модели потенциала. Однако мы проиллюстрируем такую возможность на примере спиновой системы с гамильтонианом более общего вида:

$$H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 - BS_x, \quad (7)$$

описывающим, например, двухосный парамагнетик в магнитном поле B , перпендикулярном осям анизотропии с константами $\alpha, \beta \geq 0$. В этом случае можно также прийти к стандартному уравнению Шредингера типа (2) с периодическим эффективным потенциалом

$$U_{\text{eff}}(\xi) = \frac{W_1 \operatorname{sn}^2 \xi - W_2 \operatorname{cn}^2 \xi}{\alpha + \beta \operatorname{cn}^2 \xi}, \quad (8)$$

$$W_1 = \frac{B^2}{4} - \alpha\beta S(S+1), \quad W_2 = (\alpha + \beta) B(S + 1/2),$$

построенным из эллиптических функций Якоби с модулем $k = \sqrt{\beta/(\alpha + \beta)}$.

Поскольку спиновая система (7) при небольших S допускает точное решение в виде простых явных формул для уровней энергии и векторов стационарных состояний, то и уравнение Шредингера имеет соответствующие точные решения. Собственные значения спин-гамильтониана (7) совпадают на этот раз с $2S + 1$ крайними уровнями энергии низших энергетических зон (чередующимися дном и потолком зоны) в потенциальном поле (8).

С ростом магнитного поля B минимумы ям в ячейках периодического потенциала претерпевают изменения от двойных до одиночных через четверные, а форма максимумов барьеров изменяется в обратном порядке. Интересно, что при $\alpha = \beta$ существует некоторое критическое значение магнитного поля $B_0 = 2\alpha \sqrt{S(S+1)}$, при котором потенциал имеет одновременно как четверной минимум, так и четверной максимум (рис. 2). Здесь мы ограничимся конкретными примерами именно для этого случая, полагая $\alpha = 1$.

Не останавливаясь на вопросе о волновых функциях, приведем результаты для некоторых уровней энергии E . Их нумерация отвечает спиновой системе (первый индекс соответствует верхнему знаку в формулах). Одновременно укажем, какое положение они занимают в зонах энергии эффективного потенциала.

Если $S = 0$, то $E_0 = 0$ (дно основной зоны). Если $S = 1/2$, то $E_{0,1} = \mp \sqrt{3}/2$ (окаймление первой щели). Если $S = 1$, то $E_{0,2} = \mp 3$ (дно основной зоны и дно второй зоны), а $E_1 = 0$ (потолок первой зоны). Если $S = 3/2$, то $E_{0,1} = -3\sqrt{2} \mp \sqrt{15}/2$ (эти уровни энергии окаймляют первую щель) и $E_{2,3} = 3\sqrt{2} \mp \sqrt{15}/2$ (окаймление третьей щели). Если $S = 2$, то $E_{0,4} = \mp 6\sqrt{3}$ (дно основной и дно четвертой зоны), $E_{1,3} = \mp \sqrt{33}$ (потолки первой и третьей зон), $E_2 = 0$ (дно второй зоны).

Как указано выше, в каждой из $2S + 1$ низших зон один из крайних уровней энергии является спиновым, что дает основание называть эти зоны также спиновыми. Особого внимания, однако, заслуживают более высокие зоны — «надспиновые». Оказалось, что в их расположении встречаются

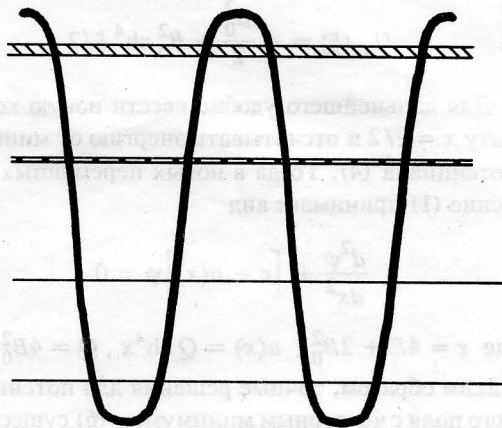


Рис. 2. Энергетические зоны эффективного потенциала (8) с четверными экстремумами и точными решениями ($S = 3/2$).

интересные особенности. Если считать S непрерывно изменяющимся, то при целых и полуцелых S все надспиновые зоны попарно стыкуются, так что половина надспиновых щелей закрывается. Кроме того, одна из надспиновых зон превращается в спиновую, а также появляются точные решения для спиновых зон. Эти превращения энергетических зон можно назвать периодическим спиновым структурным переходом.

Полагая в формулах (8) $\alpha = 0$ и $\beta = 1$ и учитывая предельные свойства эллиптических функций, получаем эффективный потенциал одноосной спиновой системы (3).

Если $B = 0$, то при целых S потенциал (8) сводится к встречающемуся в теории солитонов конечнозонному кноидальному потенциалу Ламе—Айнса, когда все надспиновые зоны смыкаются, образуя одну бесконечную зону.

На рассмотренных примерах спиновых систем мы иллюстрируем одну замечательную особенность эффективных потенциалов — наличие точных решений только для части стационарных состояний.

При этом, кроме имеющих точное решение, есть бесконечное множество расположенных над ними (по шкале энергий) стационарных состояний, для которых такое свойство, вообще говоря, отсутствует. К тому же это свойство проявляется в указанных моделях потенциалов не при всех возможных значениях входящих в них параметров, а лишь при некоторых значениях, связанных с целыми числами (мультиплетность $2S + 1$). Остальным же значениям параметров соответствуют «внеспиновые» потенциалы с «внеспиновыми» стационарными состояниями (уровнями энергии, волновыми функциями, энергетическими зонами).

Итак, обнаружилось новое, совершенно необычное, свойство квантовомеханических систем, получившее название квазиточнорешаемости. Природа подобных моделей потенциалов обычно связана с теоретико-групповыми свойствами систем. В частности, в спиновых системах основой является спин-координатное соответствие.

Если говорить о физических объектах, то квазиточнорешаемость проявилась, по-видимому, впервые именно при изучении спиновых систем.

До сих пор речь шла об одномерных задачах. Между тем замечательным свойством квазиточнорешаемых моделей является то, что точные решения удается найти и в двумерных случаях, причем без разделения переменных. Впервые это было продемонстрировано в [21]. Отметим здесь, например, работы [22,23], в которых квазиточнорешаемые модели были построены при наличии магнитного поля.

3. Солитонные локализованные потенциалы

... Мы рассмотрим здесь один случай, допускающий точное решение и приводящий к наиболее простым выражениям...

... В качестве примера изображена картина деформаций, возникающих в этой модели...

И. М. Лифшиц

Установленная в теории солитонов [3] тесная связь нелинейного эволюционного уравнения Кортевега—де Фриза (КдФ) с одномерным стационарным уравнением Шредингера позволяет указать новые типы точных решений последнего. Исследователей солитонов интересовал лишь метод решения задачи Коши для уравнения КдФ, а уравнение Шредингера при этом играло вспомогательную роль. Между тем, если рассматривать эту взаимосвязь с чисто квантовой точки зрения, то выясняется, что для уравнения Шредингера здесь обнаруживается многопараметрическое семейство потенциалов, для которых имеются достаточно простые точные явные выражения как для потенциальных моделей, так и для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний. Наибольший интерес представляет дискретная часть энергетического спектра (для локализованных потенциалов), а в непрерывной части имеется, согласно стационарной теории рассеяния, безотражательность, сверхпрозрачность, т.е. коэффициент отражения равен нулю.

Существенно, что в квантовой механике в отличие от других моделей с точными решениями, для которых задается потенциал и решается уравнение Шредингера (задача о собственных значениях), в результате чего получаются уровни энергии, в моделях солитонного происхождения сразу же задаются уровни энергии и для каждого набора уровней существуют потенциалы с точными решениями. Другими словами, мы имеем дело с обратной задачей — даны уровни энергии (произвольно расположенные!) и для них сразу же строятся потенциалы. При этом для каждого набора уровней энергии находится не один фиксированный профиль потенциала, а бесконечное многопараметрическое семейство потенциальных моделей.

Здесь на первый план выходит связь уровней энергии и потенциалов, а вопрос о волновых функциях связанных состояний оказывается вторичным. Это — наследие метода ОЗР, где сами волновые функции связанных состояний не фигурируют полностью, а представлены лишь своими асимптотическими параметрами (входят в так называемые данные рассеяния). Однако и для волновых функций также можно получить явные точные решения.

Произвольно выбирая N последовательных связанных стационарных состояний с параметрами $0 < k_1 < k_2 < \dots < k_N$ (солитонная нумерация), всегда можно построить по формулам

$$u(x) = -2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln F, \quad (9)$$

$$F = \det \left[\delta_{lm} + \frac{2 \sqrt{k_l k_m}}{k_l + k_m} \exp(2\gamma_l) \right],$$

$$\gamma_l = k_l x - 4k_l^3 t + \Delta_l + \delta_l,$$

$l, m = 1, 2, \dots, N$ (δ_{lm} — символ Кронекера), отвечающим N -солитонному решению уравнения КдФ, целое семейство пространственно локализованных потенциалов с уровнями энергии $E_n = -k_{N-n}^2$, $n = 0, 1, \dots, N-1$ и соответствующими волновыми функциями, которые удовлетворяют уравнению вида (5) и также имеют достаточно простой вид (мы их не приводим). Величина t , имеющая для солитонов физический смысл времени, здесь фигурирует в качестве постоянного параметра, который будем называть «квазивременем», величины Δ_l определяются энергетическими параметрами k_m , а фазовые добавки δ_l в случае $t = 0$ влияют на свойства симметрии моделей (9).

Потенциалы (9) имеют отрицательный знак, а их деформации при изменении квазивремени t происходят с сохранением площади.

В области непрерывного спектра энергии модели (9) обладают свойством безотражательности при рассеянии частиц [20].

При $t \rightarrow \pm\infty$ потенциал (9) состоит из N уединенных неодинаковых безотражательных ям Экарта, которые при $t = 0$ объединяются в составную яму, приобретающую разнообразные как симметричные (если все $\delta_l = 0$), так и несимметричные формы.

В случае $N = 1$ форма модели (9) фиксирована — это одноуровневая безотражательная яма Экарта, для которой всегда можно выбрать начало отсчета координаты x так, чтобы $u(x) = -2k_1^2/\text{ch}^2 k_1 x$. Аналогичный профиль получается и при $N > 1$, если $\delta_l = 0$, $k_l = lk_1$, $l = 1, \dots, N$ и $t = 0$: $u(x) = -N(N+1)k_1^2/\text{ch}^2(k_1 x)$.

В случае $N = 2$ модели (9) имеют разнообразную форму, которая зависит от двух параметров: квазивремени t и отношения энергетических величин k_2/k_1 (фазовые добавки δ_1 и δ_2 можно сделать равными нулю выбором начала отсчета x и t). При $t = 0$ в силу $u(-x) = u(x)$ имеем симметричные модели (9), о конкретном виде которых можно судить по поведению $u(x)$ вблизи $x = 0$, где при

$k_2/k_1 < \sqrt{3}$ имеется максимум, т.е. двойная яма; при $k_2/k_1 > \sqrt{3}$ — минимум, т.е. одинарная яма (в частности, при $k_2/k_1 = 2$ яма Экарта). При $k_2/k_1 = \sqrt{3}$ получается яма с уплощенным дном, т.е. минимум 4-го порядка:

$$u(x) = -4k_1^2 + \frac{8}{3}k_1^6 x^4 - \frac{32}{15}k_1^8 x^6 + O(x^8).$$

При $t \neq 0$ получаются несимметричные модели.

Если одно- и двухуровневые потенциалы (9) достаточно хорошо знакомы по соответствующим солитонным профилям, то этого нельзя сказать уже о трехуровневых моделях, когда имеется четыре независимых параметра: k_3/k_1 , k_2/k_1 , t и одна из фазовых добавок, например δ_1 (две другие влияют лишь на начало отсчета x и t , так что их можно считать равными нулю). Если при этом $t = 0$ и $\delta_1 = 0$, то имеем симметричные формы потенциалов (9), вид которых зависит прежде всего от поведения вблизи $x = 0$. Несложные вычисления показывают, что

$$u(x) = -2(k_3^2 - k_2^2 + k_1^2) + 2\left[k_3^4 - (k_2^2 - k_1^2)(4k_3^2 - 3k_2^2 + k_1^2)\right]x^2 - \frac{4}{3}\left\{k_3^6 - (k_2^2 - k_1^2)\left[6k_3^4 - 2(5k_2^2 - 3k_1^2)k_3^2 + 5k_2^4 - 5k_2^2k_1^2 + k_1^4\right]\right\}x^4 + O(x^6).$$

Таким образом, при условии

$$k_3^4 - 4(k_2^2 - k_1^2)k_3^2 + (k_2^2 - k_1^2)(3k_2^2 - k_1^2) = 0$$

возникают экстремумы 4-го порядка. На плоскости $(k_2^2/k_1^2, k_3^2/k_1^2)$ это соответствует ветви гиперболы, часть которой относится к четверным минимумам (рис. 3, д), а другая часть — к четверным максимумам (рис. 3, е). На стыке минимумов и максимумов есть минимум 6-го порядка (рис. 3, ж) при значениях $k_2/k_1 = \sqrt{2 + \sqrt{2}}$ и $k_3/k_1 = \sqrt{3 + 2\sqrt{2}}$, для которых разложение потенциала имеет вид

$$u(x) = -2(2 + \sqrt{2})k_1^2 + \frac{4}{45}(17 + 12\sqrt{2})k_1^8 x^6 - \frac{8}{315}(58 + 41\sqrt{2})k_1^{10} x^8 + O(x^{10}).$$

На рис. 3 приведены некоторые типичные симметричные профили, соответствующие различным соотношениям энергетических величин. При $t \neq 0$

и (или) $\delta_1 \neq 0$ получаются несимметричные профили.

Таким образом, множество потенциалов с простыми явными точными решениями в квантовой механике существенно обогащается локализованными многопараметрическими моделями различного вида. Кроме локализованных потенциалов существуют также периодические (и почти периодические) конечнозонные потенциальные модели солитонной природы [3], которые мы не будем рассматривать.

Поворот в сторону квантовомеханической ситуации и постановка вопроса о точных решениях уравнения Шредингера солитонного происхождения в книгах по квантовой механике, за исключением [16], по-видимому, в этом аспекте специально еще не обсуждались.

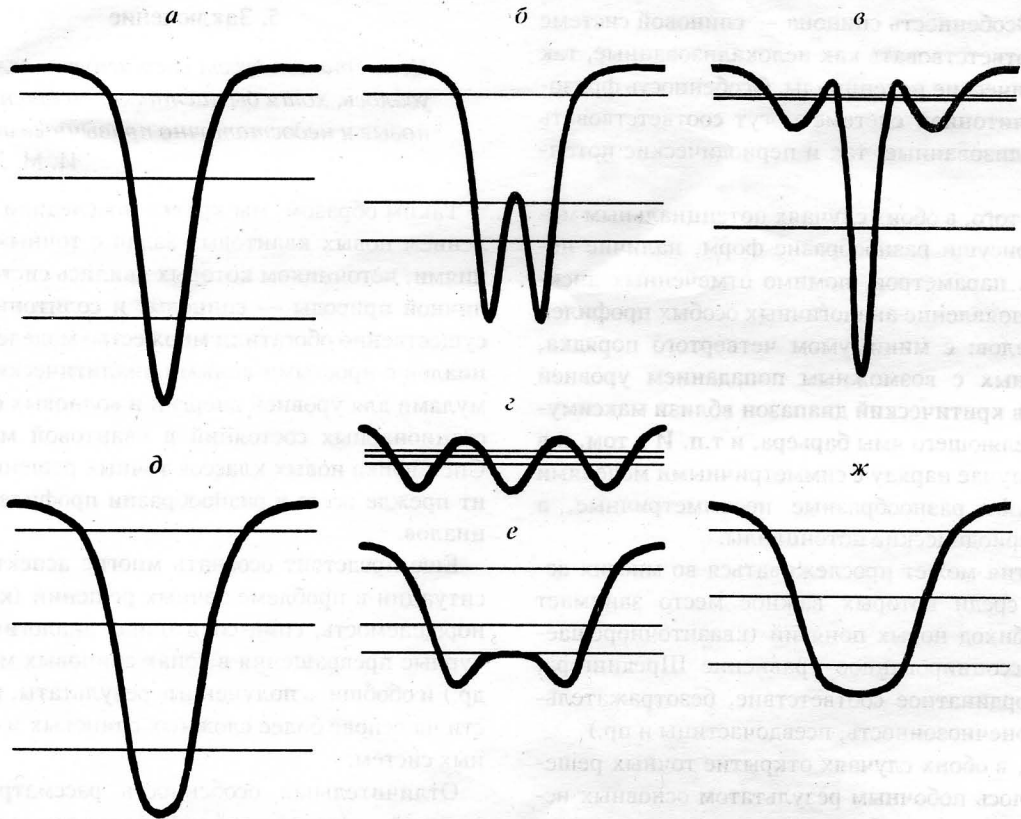


Рис. 3. Характерные профили точно решаемых трехуровневых симметричных потенциальных моделей солитонной природы.

4. Спин-солитонная аналогия

Несмотря на видимое физическое различие этих задач, они обнаруживают глубокое сходство.

И. М. Лифшиц

Между спиновыми и солитонными моделями потенциальных полей имеется много общего.

Так, спин-координатное соответствие в теории спиновых систем является аналогом так называемой «пары Лакса» теории солитонов, т.е. солитон-координатного соответствия. В обоих случаях имеется некоторое ассоциированное уравнение Шредингера, с помощью которого решаются главные задачи — проблема энергетического спектра (или более общо — стационарных состояний) в спиновых системах и задача Коши в теории солитонов для нелинейного эволюционного уравнения Кортевега—де Фриза. В спин-координатном соответствии связующую роль играет представление спиновых когерентных состояний, тогда как в солитон-координатном соответствии аналогичную роль играет интегральное преобразование Гельфанда—Левитана—Марченко в методе ОЗР.

В обоих случаях исходные элементы — дискретные (спин и солитон), а им ставятся в соответствие

непрерывные координатные представления с одномерными потенциальными полями и некоторым энергетическим соответствием. В спиновом случае имеем спиновый спектр и надспиновые уровни энергии для нелокализованных потенциалов, а в солитонном случае имеем у локализованных потенциалов дискретный солитонный спектр и непрерывный «надсолитонный» с полной прозрачностью. Еще один общий аспект — целочисленная аналогия: в спиновом случае основным параметром потенциальных моделей является целое число $2S + 1$, тогда как эквивалентным элементом в солитонном случае служит число солитонов N .

Типичная для солитонных периодических (и почти периодических) моделей конечнотонность встречается и в спиновых моделях.

Общей спин-солитонной особенностью является четкое разбиение энергетического спектра на две части: в спиновых системах это выражается в квазиточнорешаемости, а в солитонных — в безотражателности (и конечнотонности).

При этом можно считать, что соответствующее уравнение Шредингера описывает состояния некоторых псевдочастиц — «спинона» в случае спиновых систем и «фризона» в случае солитонных

систем. Особенность спинона — спиновой системе могут соответствовать как нелокализованные, так и периодические потенциалы. Особенность фризона — солитонной системе могут соответствовать как локализованные, так и периодические потенциалы.

Кроме того, в обоих случаях потенциальным моделям присущи разнообразие форм, наличие нескольких параметров, помимо отмеченных дискретных, появление аналогичных особых профилей потенциалов: с минимумом четвертого порядка, двухъямных с возможным попаданием уровней энергии в критический диапазон вблизи максимума, разделяющего ямы барьера, и т.п. И в том, и в другом случае наряду с симметричными моделями существуют разнообразные несимметричные, а также периодические потенциалы.

Аналогия может проследиваться во многих аспектах, среди которых важное место занимает ввод в обиход новых понятий (квазиточнорешаемость, ассоциированное уравнение Шредингера, спин-координатное соответствие, безотражательность, конечнозонность, псевдочастицы и пр.)

Далее, в обоих случаях открытие точных решений явилось побочным результатом основных исследований — разработки новых методов в теории спиновых и солитонных систем. Солитонный бум в значительной степени эксплуатировал квантовую теорию, но его достижения остались в основном в трудах по солитонике и не перешли еще в монографии по квантовой механике и ее приложениям (см., однако, [16]). Та же ситуация сложилась и в отношении проблемы квазиточнорешаемых задач и новых подходов в теории спиновых систем, хотя здесь речь идет главным образом о связи между двумя разделами самой квантовой механики. В проблеме квазиточнорешаемых задач все большую долю забирает себе математическая физика и чистая математика [8,9], как было и в теории солитонов.

Таким образом, между двумя совершенно различными системами, поставляющими в квантовую теорию модели с точными решениями, имеется целый ряд соответствий. По-видимому, еще предстоит выяснить вопрос о том, является ли это чисто внешней аналогией, или за этим скрыто глубокое структурное сходство.

5. Заключение

Цель статьи будет достигнута, если нам удалось, хотя бы частично, разъяснить ... новые и недостаточно привычные идеи...

И. М. Лифшиц

Таким образом, мы кратко проследили за появлением новых квантовых задач с точными решениями, источником которых явились системы различной природы — спиновые и солитонные. Они существенно обогатили множество моделей потенциалов с простыми явными аналитическими формулами для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний в квантовой механике. Специфика новых классов точных решений состоит прежде всего в разнообразии профилей потенциалов.

Еще предстоит осознать многие аспекты новой ситуации в проблеме точных решений (квазиточнорешаемость, спин-солитонная аналогия, структурные превращения в зонах спиновых моделей и др.) и обобщить полученные результаты, в частности на основе более сложных спиновых и солитонных систем.

Отличительная особенность рассматриваемых моделей — физический смысл уже при своем появлении, поскольку они явились не плодом математических преобразований, а результатом исследования конкретных систем, в частности спиновых и солитонных.

В заключение отметим, что в настоящее время квантовые задачи с точными решениями — активное, бурно развивающееся направление.

Авторы чрезвычайно признательны за возможность опубликовать этот материал в выпуске журнала, посвященном выдающемуся ученому и прекрасному человеку И. М. Лифшицу. Данная работа выполнена представителями трех поколений физиков-теоретиков его школы.

Выражаем глубокую благодарность В. М. Цукернику, вместе с которым были сделаны наши первые шаги в разработке новых методов теории спиновых систем.

1. И. М. Лифшиц, *Избранные труды. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).
2. И. М. Лифшиц, *Избранные труды. Электронная теория металлов. Физика полимеров и биополимеров*, Наука, Москва (1994).
3. В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский, *Теория солитонов. Метод обратной задачи*, Наука, Москва (1980).
4. V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii, *Phys. Rept.* **216**, 179 (1992).

5. В. Г. Багров, Д. М. Гитман, И. М. Тернов, В. Р. Халилов, В. Н. Шаповалов, *Точные решения релятивистских волновых уравнений*, Наука, Новосибирск (1982).
6. И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов, *Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции*, Наука, Москва (1976).
7. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, В. М. Цукерник, *ФНТ* 9, 511 (1983).
8. A. V. Turbiner, *Commun. Math. Phys.* 118, 467 (1988); *Contemp. Math.* 160, 263 (1994).
9. А. Г. Ушверидзе, *ЭЧАЯ* 20, 1185 (1989).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
11. З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике*, Мир, Москва (1974).
12. В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган, *Задачи по квантовой механике*, Наука, Москва (1981).
13. В. В. Ульянов, *Задачи по квантовой механике и квантовой статистике*, Высшая школа, Харьков (1980).
14. В. В. Ульянов, *Интегральные методы в квантовой механике*, Высшая школа, Харьков (1982).
15. А. М. Переломов, *Обобщенные когерентные состояния и их применения*, Наука, Москва (1987).
16. В. В. Ульянов, *Методы квантовой кинетики*, Высшая школа, Харьков (1987).
17. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, *ЖЭТФ* 87, 1724 (1984).
18. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, *ТМФ* 71, 260 (1987).
19. S. I. Chan, D. Stelman, and L. E. Thompson, *J. Chem. Phys.* 41, 2828 (1964).
20. I. Kay and H. E. Moses, *J. Appl. Phys.* 27, 1503 (1956).
21. M. A. Shifman and A. V. Turbiner, *Commun. Math. Phys.* 126, 347 (1989).
22. O. B. Zaslavskii, *Phys. Lett. A* 190, 373 (1994).
23. O. B. Zaslavskii, *J. Phys. A* 27, L447 (1994).

New exact solutions of Schrödinger equation with potentials of spin and soliton origin

V. V. Ulyanov,

O. B. Zaslavskii, and J. V. Vasilevskaya

New classes of exact solutions of the Schrödinger equation are considered which involve simple explicit analytic expressions for potential fields, energy levels and wave functions of stationary states. They are derived with the use of new methods elaborated in the quantum theory of spin systems. Corresponding effective potentials are compared with similar models of a soliton origin. The most attention is given to new unusual phenomena (quasi-exact solvability, potentials with flexible profiles, fourth-order extrema, finite-band spectra and structural transformations in energy bands, spin-soliton analogy).

Ф
Н
Т

New exact solutions of the Schrödinger equation with potentials of spin and soliton origin

V. V. Ulyanov, O. B. Zaslavskii, and Yu. V. Vasilevskaya

Kharkov State University, 310077 Kharkov, Ukraine

(Submitted June 24, 1996)

Fiz. Nizk. Temp. 23, 110–119 (January 1997)

New classes of exact solutions of the Schrödinger equation with simple explicit analytic expressions for potential fields, energy levels, and wave functions of stationary states are considered. The solutions are discovered with the help of new original methods elaborated in the quantum theory of spin systems. The corresponding effective potentials are compared to similar models of soliton origin. The main attention is paid to peculiar phenomena such as quasi-exact solvability, potentials with multiple and flexible profiles, fourth-order extrema, finite-band spectra and structural transformations in energy bands, and the spin-soliton analogy. © 1997 American Institute of Physics. [S1063-777X(97)01201-2]

1. INTRODUCTION

*Exact solutions of these equations have been obtained. In order to clarify the following considerations, we consider this question in greater detail . . .*¹⁾

I. M. Lifshits

The quantum-mechanical problem of exact solutions of the Schrödinger equation for stationary states of a particle in a potential field remains the object of interest for specialists. The number of potentials permitting a simple exact solution was scarce until recently. The situation has changed after the development of the method of inverse scattering problem (ISP) in soliton theory.³ Finally, a noticeable breakthrough in the problem of exact solutions of the Schrödinger equation has been made⁴ of when original methods in the theory of spin systems were elaborated, and several new classes of exact solutions were indicated, together with the directions of a search for such solutions. Moreover, exact solutions of the Schrödinger equation with simple explicit expressions for potentials, energy levels, and wave functions of stationary states form a solid "golden" foundation of the quantum theory.

The problem of exact solution naturally attracts persistent attention. We can single out three periods in which new models with exact solutions were created.

The first models with exact solutions with simple expressions for potentials, energy levels and wave functions of stationary states (harmonic oscillator, Morse, Eckart, and Peschel-Teller potentials, infinitely deep rectangular well, and delta-well) appeared at the early stage of evolution of quantum mechanics at the end of the twenties.

This stage was followed by a period of various generalizations, complications, and compositions of different models.^{5,6} The search for new models with exact solutions continued, but the results were either too complicated and cumbersome, or too abstract.

The first breakthrough into the region of new simple models with exact solutions is associated with the evolution of soliton theory, since in the case of ISP, soliton formations play the role of potential fields in the time-independent Schrödinger equation for a certain quantum particle

(pseudoparticle). Such soliton-type exact solutions are characterized by fixed energy levels (which are integrals of motion of the Korteweg-de Vries nonlinear evolution equation)³ for potentials with flexible profiles, and the states of the continuous spectrum correspond to complete transparency for scattered particles.

Another trend is associated with the discovery of a basically new object in quantum mechanics, viz., quasi-exactly solvable models. The insight moment was the discovery of a whole class of new models with exact solutions in connection with the development of new methods in the theory of spin systems.⁷ Spin systems in relevant effective potential fields with exact solutions of the Schrödinger equation are characterized by various potential profiles depending on the choice of the spin parameter and the values of magnetic fields and by simple formulas for the energy spectrum and corresponding wave functions.⁴

These two new trends have made a sound contribution to the depository of problems with exact solutions.

The subsequent evolution of quasi-exactly solvable models resulted in the development of a new branch of mathematics and mathematical physics (see Refs. 8 and 9 and the literature cited therein), but here we shall confine the analysis to only a few physical aspects of the problem.

Why are exact solutions of the type under investigation so important?

It should be emphasized above all that they form the basis of stationary states in quantum mechanics (see, for example, Refs. 10–14). It should also be noted that exact solutions are foundations of new problems. The significance of exact solutions as the basis of approximate methods is also worth noting. The models with exact solutions are often used in the analysis of complex phenomena for which exact regularities are unknown or in the case when basic properties are independent of the form of the potential and can be studied by disregarding complications introduced by the potential details. For example, I. M. Lifshits¹ often used the so-called separable model of perturbation. It should also be noted that new theories are usually verified on the basis of well-known special cases with exact solutions. In addition, the problems

with exact solutions serve as test examples in numerical methods.

In all probability, the problem of exact solutions will remain important in the future.

2. EFFECTIVE SPIN POTENTIALS

As a rule, it is easier to study differential equations than their discrete analogs . . .

I. M. Lifshits

Spin systems form a special class of quantum systems whose Hamiltonian contains spin operators (effective spin, pseudospin, etc.). Such systems are encountered in many fields of physics (magnetism and superconductivity, nuclear physics, and interaction between light and a substance). The description of such systems involves special methods of theoretical physics since the commutation relations for spin components differ from the Bose- and Fermi-type relations. The methods for many-particle systems have received wide application, while systems with one-spin Hamiltonian remained unnoticed. Anisotropic paramagnets can be mentioned in this connection by way of an example. This also applies to many-particle systems since collective degrees of freedom of the one-particle type can describe in some cases the motion of the system as a whole.⁴

Spin is a quantum-mechanical concept of essentially discrete origin. For this reason, the equation required for an analysis of the energy spectrum of spin systems has a matrix form. For large values of spin, this complicates the analysis of the properties of the system with the help of standard quantum-mechanical methods. It turned out, however, that we can introduce a rigorous potential description for a wide class of spin systems such that the energy spectrum of the spin system coincides with certain energy levels of a pseudoparticle moving in a potential field of a simple shape. Such an exact spin-coordinate correspondence also forms the basis for the development of various approximate methods for describing spin systems, e.g., the perturbation theory and the semiclassical approximation. It is especially important that this leads to new exact solutions of the Schrödinger equation in an appropriate coordinate system.⁴

In the approach proposed by us, the Hamiltonians constructed from generators of a certain Lie group (in particular, spin operators) are considered, and the eigenvalue and eigenvector problem is solved by using the concept of generalized¹⁵ coherent states (including spin states). In the obtained coordinate representation, such a Hamiltonian becomes a differential operator, e.g., the Schrödinger operator with a certain effective potential energy. The potentials obtained for simple spin systems either have the form of non-localized wells, or are periodic. In all cases, various multiparametric potential models (both symmetric and asymmetric) exist.

Going over to specific examples, we first consider one of the simplest spin-Hamiltonians (here and below, we use dimensionless quantities without loss of generality), corresponding to the so-called easy-axis paramagnet in a transverse magnetic field:⁷

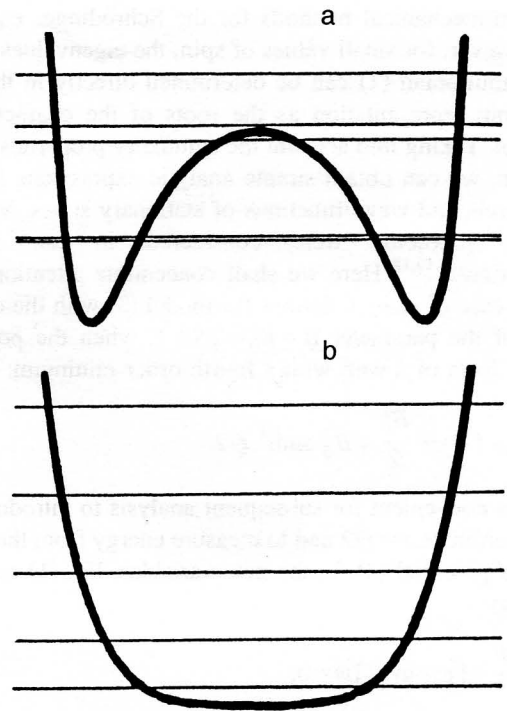


FIG. 1. Typical effective potentials (3) for $S=2$: a well with two minima for $B < B_0$ (a) and a well with a fourth-order minimum for $B = B_0$ (b).

$$H = -S_y^2 - BS_x. \quad (1)$$

Here S_j are operators of spin components and B is proportional to the applied magnetic field. If we are dealing with the problem of determination of stationary states of such a system with the help of the above method, we arrive at the standard one-dimensional Schrödinger equation

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + [E - U_{\text{eff}}(\xi)]\psi = 0 \quad (2)$$

for a pseudoparticle with a quadratic energy-momentum relation (spinon) moving in the effective potential field constructed from hyperbolic functions:

$$U_{\text{eff}}(\xi) = \frac{B^2}{4} \sinh^2 \xi - B(S + 1/2) \cosh \xi, \quad (3)$$

where S is the magnitude of spin and ξ can be regarded as a certain dimensionless coordinate. It turns out⁴ that the energy eigenvalues E of the spin system (1) coincide with the lower $2S+1$ energy levels of a spinon in the potential field (3).

Such an approach to the description of spin systems was used for studying the low-temperature physical properties (such as energy spectrum, magnetization, susceptibility, and spin tunneling) of anisotropic paramagnets.^{4,7}

For a magnetic field $B > B_0 = 2S+1$, the obtained non-localized potential (3) has the form of a solitary well, while for $B < B_0$ it is transformed into a well with two minima (Fig. 1a). It is important that for $B = B_0$ this model has the form of a well with a fourth-order minimum (Fig. 1b).

For large values of spin ($S \gg 1$), the spin-coordinate correspondence established above is convenient for studying the properties of a spin system⁴ by using the standard

quantum-mechanical methods for the Schrödinger equation (2); however, for small values of spin, the eigenvalues of the spin-Hamiltonian (1) can be determined directly in the discrete spin representation as the roots of the characteristic equation. Taking into account the symmetry properties of the problem, we can obtain simple analytic expressions for energy levels and wave functions of stationary states. Various specific problems were considered in our earlier publications.^{4,17,18} Here we shall concentrate attention on a special case of exact solutions for model (3) with the critical value of the parameter $B=B_0=2S+1$, when the potential has the form of a well with a fourth-order minimum:

$$U_{\text{eff}}(\xi) = -\frac{B_0^2}{2} + B_0^2 \sinh^4 \xi/2. \quad (4)$$

It is convenient for subsequent analysis to introduce the new coordinate $x = \xi/2$ and to measure energy from the minimum of potential (4). In the new variables, Eq. (1) assumes the form

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [\varepsilon - u(x)]\psi = 0, \quad (5)$$

where

$$\varepsilon = 4E + 2B_0^2; \quad u(x) = Q \sinh^4 x, \quad Q = 4B_0^2. \quad (6)$$

Thus, exact solutions for a potential field with a fourth-order minimum (6) exist for the values of $Q = 4(2S+1)^2$, where $S = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$. It was noted above that in this case simple explicit expressions for energy levels and wave functions of stationary states are obtained for small values of parameter S . Omitting computational details, we shall write some of these expressions (the first indices on energy correspond to the upper signs in the formulas). If $S=0$, for the ground state we have

$$\varepsilon_0 = 2; \quad \psi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{1}{2} \cosh 2x\right).$$

If $S=1/2$, the ground state is supplemented with the first excited state:

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= 3; \quad \psi_0(x) = A_0 \exp(-\cosh 2x) \cosh x; \\ \varepsilon_1 &= 11; \quad \psi_1(x) = A_1 \exp(-\cosh 2x) \sinh x. \end{aligned}$$

For $S=1$, the formulas acquire radicals:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,2} &= 16 \mp 2\sqrt{37}; \\ \psi_{0,2}(x) &= A_{0,2} \exp\left(-\frac{3}{2} \cosh 2x\right) \left(\cosh 2x \pm \frac{\sqrt{37} \mp 1}{6}\right); \\ \varepsilon_1 &= 14; \quad \psi_1(x) = A_1 \exp\left(-\frac{3}{2} \cosh 2x\right) \sinh 2x. \end{aligned}$$

If $S=3/2$, we have the following expressions for four states with low-lying energy levels:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,2} &= 19 \mp 4\sqrt{13}; \quad \psi_{0,2}(x) = A_{0,2} \exp(-2 \cosh 2x) \\ &\times \left(\cosh 3x \pm \frac{\sqrt{13} \mp 1}{2} \cosh x\right); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,3} &= 35 \mp 4\sqrt{21}; \quad \psi_{1,3}(x) = A_{1,3} \exp(-2 \cosh 2x) \\ &\times \left(\sinh 3x \pm \frac{\sqrt{21} \mp 3}{2} \sinh x\right). \end{aligned}$$

For $S=2$, we confine ourselves to only two energy levels. These expressions contain not only radicals:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{2n} &= \frac{130}{3} + \frac{8}{3} \sqrt{313} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{1765}{313^{3/2}}\right) + \varphi_n\right], \\ n &= 0, 1, 2; \\ \varphi_{0,1} &= \pm \frac{2}{3} \pi, \quad \varphi_2 = 0; \quad \varepsilon_{1,2} = 40 \mp 2\sqrt{109}. \end{aligned}$$

Normalization quantities are connected with modified Bessel's functions (Macdonald functions); for example, $A_0 = [K_0(1)]^{-1/2}$ for $S=0$.

It should be emphasized that the number of exact solutions in the model under investigation is finite. This property is known as "quasi-exact solvability."⁸ In this case, stationary states with exact solutions (the multiplet $2S+1$ of energy levels) lie in the lower part of the energy spectrum (starting from the ground state), while the remaining stationary ("superspin") states have no exact solutions.

It is well known that the power potential $u(x) = Qx^4$ (quadruple oscillator) has no exact solutions, being an important element of many essentially anharmonic systems.¹⁹ Thus, a paradoxical situation takes place: a simpler model of the fourth-degree potential has no exact solutions, while a more complex 4-hyperbolic model (6), which is close to the former model both qualitatively and quantitatively, has such solutions. A comparison of the energy levels of these two models shows that they become closer upon an increase in the parameter S in (6), and the relative error is of the order of $S^{-2/3}$.

It is important to note that we have thus obtained another method of determining the energy levels of a quadruple oscillator with the help of model (6) with exact solutions. In a more general case, this applies to a mixed quadratic-quadruple oscillator in the exactly solvable model (3).

For the system with the spin-Hamiltonian (1) under investigation, we can also introduce a description on the basis of a certain periodic model of potential. However, we shall illustrate such a possibility for a spin system with the Hamiltonian of a more general type:

$$H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 - B S_x, \quad (7)$$

describing, for example, a biaxial paramagnet in a magnetic field B perpendicular to anisotropy axes with the constants $\alpha, \beta \geq 0$. In this case, we can also arrive at the standard Schrödinger equation of type (2) with the periodic effective potential

$$\begin{aligned} U_{\text{eff}}(\xi) &= \frac{W_1 \sin^2 \xi - W_2 \cos \xi}{\alpha + \beta \cos^2 \xi}, \\ W_1 &= \frac{B^2}{4} - a\beta S(S+1), \quad W_2 = (\alpha + \beta)B(S+1/2), \end{aligned} \quad (8)$$

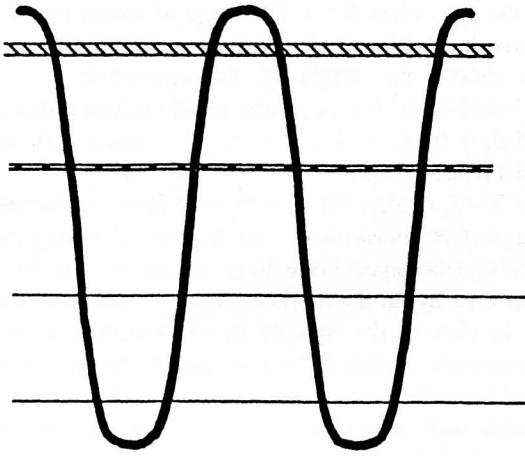


FIG. 2. Energy bands of the effective potential (8) with fourth-order extrema and exact solutions ($S=3/2$).

constructed from Jacobi elliptic functions with the modulus $k = \sqrt{\beta/(\alpha + \beta)}$.

Since the spin system (7) has an exact solution in the form of simple explicit formulas for energy levels and vectors of stationary states for small S , the Schrödinger equation also has corresponding exact solutions. The eigenvalues of the spin-Hamiltonian (7) coincide in this case with $2S+1$ extreme energy levels for the lower energy bands (alternating bottom and top of the energy band) in the potential field (8).

With increasing magnetic field B , the minima of the wells in the cells of the periodic potential are transformed from binary to solitary minima through quadruple minima, while the shape of barrier peaks changes in the reverse order. It is interesting to note that for $\alpha = \beta$ there exists a critical value of magnetic field $B_0 = 2\alpha\sqrt{S(S+1)}$ for which the potential has a quadruple minimum and a quadruple maximum simultaneously (Fig. 2). We shall confine our analysis to specific examples for this case putting $\alpha = 1$.

We will not consider here wave functions but describe the results for some energy levels E . Energy levels are labeled according to the spin system (the first index corresponds to the upper sign in the formulas). Their positions in the energy bands of effective potentials will be indicated simultaneously.

If $S=0$, $E_0=0$ (the bottom of the ground-state band). For $S=1/2$, $E_{0,1} = \mp\sqrt{3}/2$ (extreme levels of the first gap). For $S=1$, $E_{0,2} = \mp 3$ (the bottom of the ground-state band and the bottom of the second band), while $E_1=0$ (the top of the first band). If $S=3/2$, $E_{0,1} = -3\sqrt{2} \mp \sqrt{15}/2$ (extreme energy levels of the first gap) and $E_{2,3} = 3\sqrt{2} \mp \sqrt{15}/2$ (extreme energy levels of the third gap). For $S=2$, $E_{0,4} = \mp 6\sqrt{3}$ (the bottom of the ground-state band and the bottom of the first band), $E_{1,3} = \mp\sqrt{33}$ (the tops of the first and third bands), and $E_2=0$ (the bottom of the second band).

It was mentioned above that one of extreme energy levels in each of $2S+1$ lower bands is a spin level, which allows us to refer to these bands as spin bands. However, higher ("superspin") bands deserve special attention. It was found that their arrangement has interesting peculiarities. If we assume that the value of S varies continuously, all the

superspin bands match pairwise so that half the superspin gaps are closed. In addition, one of the superspin bands is converted into a spin band, and exact solutions for spin bands appear. These transformations of energy bands can be called a periodic structural spin transition.

Putting $\alpha=0$ and $\beta=1$ in formulas (8) and taking into account the limiting properties of elliptic functions, we obtain the effective potential of a uniaxial spin system (3).

If $B=0$, potential (8) for integral S can be reduced to the Lamé-Eines finite-band conoidal potential for which all superspin bands are interlocked to form a single infinitely large band.

The above examples of spin systems illustrate a remarkable feature of effective potentials, viz., the existence of exact solutions only for a part of stationary states.

In addition to stationary states having exact solutions, there exists an infinite set of stationary states lying above them (on the energy scale), for which this property is absent in general. Also, this property is manifested in the above models of potentials not for all possible values of parameters appearing in them, but only for certain values associated with integers (of multiplicity $2S+1$). The remaining values of parameters correspond to "extraspins" potentials with "extraspins" stationary states (energy levels, wave functions, and energy bands).

Thus, we have discovered a new peculiar property of quantum-mechanical systems known as quasi-exact solvability. The origin of such models of potentials usually lies in the group-theoretical properties of systems. Among other things, the basis of spin systems is the spin-coordinate correspondence.

As regards physical objects, quasi-exact solvability was apparently manifested for the first time for spin systems.

Until now, we considered only one-dimensional problems. However, a remarkable property of models with quasi-exact solutions is that exact solutions can be also obtained in two-dimensional cases even without separating the variables. This was demonstrated for the first time in Ref. 21. It is appropriate to mention here the publications^{22,23} in which models with quasi-exact solutions were constructed in the presence of a magnetic field.

3. LOCALIZED SOLITON POTENTIALS

... We consider here a special case permitting an exact solution and leading to the simplest expressions ...

... By way of an example, we depict the pattern of deformations emerging in this model ...

I. M. Lifshits

The close relation between the nonlinear evolution Korteweg-de Vries (KdV) equation and the one-dimensional time-independent Schrödinger equation established in soliton theory³ makes it possible to indicate new types of exact solutions of the latter equation. The authors studying solitons were interested only in the method of solution of the Cauchy problem for the KdV equation, and the Schrödinger equation played only an auxiliary role. If, however, we consider this dependence only from a purely quantum-mechanical point of view, we find that the Schrödinger equation has a multipara-

metric family of potentials for which simple exact explicit expressions exist for potential models as well as for energy levels and wave functions of stationary states. The discrete part of energy spectrum (for localized potentials) is most interesting, while the continuous part is characterized, in accordance with the steady-state theory of scattering, by zero reflection (supertransparency), i.e., its reflection coefficient is equal to zero.

It is important that, in contrast to other models with exact solutions in quantum mechanics, for which the potential is specified, and the Schrödinger equation (the eigenvalue problem) is solved (as a result, energy levels are obtained), in models of soliton origin the energy levels are defined straightaway, and each set of the levels is characterized by potentials with exact solutions. In other words, we are dealing with an inverse problem: energy levels (arranged arbitrarily) are given, and potentials are constructed for them directly. In this case, each set of energy levels is characterized not by a single fixed potential profile, but by an infinite multiparametric family of potential models.

The relation between energy levels and potentials becomes of primary importance, while wave functions of bound states play an insignificant role. This was inherited from the ISP method in which the wave functions of bound states do not appear in a complete form, but are represented only through their asymptotic parameters (they appear as so-called scattering data). However, explicit exact solutions can be obtained for wave functions also.

Choosing N successive bound stationary states arbitrarily with parameters $0 < k_1 < k_2 < \dots < k_N$ (soliton numbering), we can always use the formulas

$$u(x) = -2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln F,$$

$$F = \det \left[\delta_{lm} + \frac{2\sqrt{k_l k_m}}{k_l + k_m} \exp(2\gamma_l) \right],$$

$$\gamma_l = k_l x - 4k_l^3 t + \Delta_l + \delta_l, \quad (9)$$

$l, m = 1, 2, \dots, N$ (δ_{lm} is the Kronecker delta) corresponding to the N -soliton solution of the KdV equation, to construct a family of spatially localized potentials with energy levels $E_n = -k_{N-n}^2$, $n = 0, 1, \dots, N-1$ and corresponding wave functions which satisfy an equation of the type (5) and at the same time have a simpler form (we do not write them here). The quantity t having the physical meaning of time for solitons, appears here as a constant parameter which will be referred to as "quasi-time," the quantities Δ_l are determined by energy parameters k_m , while phase corrections δ_l for $t=0$ affect the symmetry properties of models (9).

Potentials (9) are negative, and their deformations upon the variation of quasi-time t occur with area conservation.

In the region of continuous energy spectrum, models (9) are reflectionless in the case of particle scattering.²⁰

For $t \rightarrow \pm\infty$, potential (9) consists of N different solitary reflectionless Eckart wells which are combined for $t=0$ into a composite well acquiring various symmetric properties (if all $\delta_l=0$) as well as asymmetric forms.

In the case when $N=1$, the shape of model (9) is fixed; it is a one-level reflectionless Eckart well for which we can always choose the origin of the coordinate x so that $u(x) = -2k_1^2/\cosh^2 k_1 x$. A similar profile is also obtained for $N>1$ if $\delta_l = 0$, $k_l = lk_1$, $l = 1, \dots, N$ and $t=0$: $u(x) = -N(N+1)k_1^2/\cosh^2(k_1 x)$.

For $N=2$, models (9) have various forms determined by two parameters: quasi-time t and the ratio of energy parameters k_2/k_1 (the phase corrections δ_1 and δ_2 can be made equal to zero by an appropriate choice of the parameters x and t). In view of the equality $u(-x) = u(x)$, for $t=0$ we have symmetric models (9) whose specific forms can be determined from the behavior of $u(x)$ near $x=0$, where a peak, i.e., double well, exists for $k_2/k_1 < \sqrt{3}$ and a minimum, i.e., a solitary well (in particular, an Eckart well for $k_2/k_1 = 2$) exists for $k_2/k_1 > \sqrt{3}$. For $k_2/k_1 = \sqrt{3}$, we have a well with a flat bottom, i.e., a fourth-order minimum:

$$u(x) = -4k_1^2 + \frac{8}{3}k_1^6 x^4 - \frac{32}{15}k_1^8 x^6 + O(x^8).$$

For $t \neq 0$, we have asymmetric models.

While one- and two-level potentials (9) are well known from the corresponding soliton profiles, it is not possible to speak of three-level models with four independent parameters $k_3/k_1, k_2/k_1, t$ and one of the phase corrections (say, δ_1 ; the other two corrections affect only the origin of x and t and can be disregarded). If $t=0$ and $\delta_1=0$, we have symmetric forms of potentials (9) which are determined above all by the behavior near $x=0$. Simple calculations show that

$$\begin{aligned} u(x) = & -2(k_3^2 - k_2^2 + k_1^2) + 2[k_3^4 - (k_2^2 - k_1^2)(4k_3^2 - 3k_2^2 \\ & + k_1^2)]x^2 - \frac{4}{3}\{k_3^6 - (k_2^2 - k_1^2)[6k_3^4 - 2(5k_2^2 \\ & - 3k_1^2)k_3^2 + 5k_2^4 - 5k_2^2 k_1^2 + k_1^4]\}x^4 + O(x^6). \end{aligned}$$

Thus, under the condition

$$k_3^4 - 4(k_2^2 - k_1^2)k_3^2 + (k_2^2 - k_1^2)(3k_2^2 - k_1^2) = 0$$

we have fourth-order extrema. On the plane $(k_2^2/k_1^2, k_3^2/k_1^2)$, this corresponds to a branch of a hyperbola whose one part corresponds to fourth-order minima (Fig. 3e), and the other part to fourth-order maxima (Fig. 3f). A sixth-order minimum appears at the junction of minima and maxima (Fig. 3g) for the values $k_2/k_1 = \sqrt{2} + \sqrt{2}$ and $k_3/k_1 = \sqrt{3} + 2\sqrt{2}$ for which the expansion of the potential has the form

$$\begin{aligned} u(x) = & -2(2 + \sqrt{2})k_1^2 + \frac{4}{45}(17 + 12\sqrt{2})k_1^8 x^6 \\ & - \frac{8}{315}(58 + 41\sqrt{2})k_1^{10} x^8 + O(x^{10}). \end{aligned}$$

Figure 3 shows some typical symmetric profiles corresponding to various relations between energy parameters. For $t \neq 0$ and/or $\delta_1 \neq 0$, we obtain asymmetric profiles.

Thus, a set of potentials with simple explicit exact solutions in quantum mechanics is considerably enriched with localized multiparametric models of various types. Apart

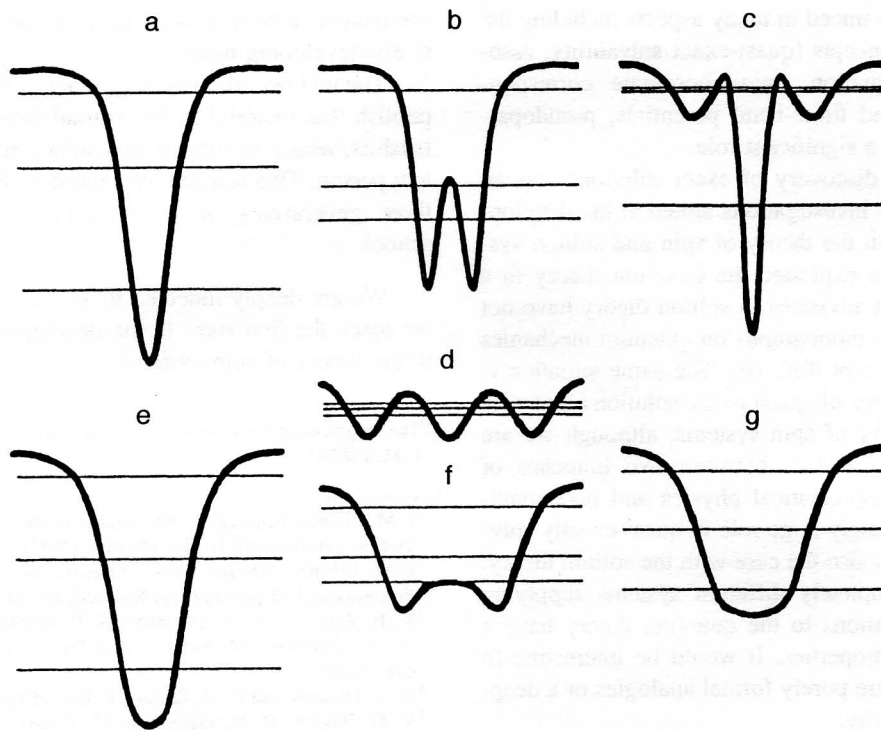


FIG. 3. Characteristic profiles of exactly solvable three-level symmetric potential models of soliton origin.

from localized potentials, periodic (or nearly periodic) finite-band potential models of soliton origin also exist,³ but we shall not consider them here.

A transition to the quantum-mechanical situation and the formulation of the problem on exact solutions of the Schrödinger equation of the soliton origin have not been discussed in monographs on quantum mechanics from this point of view (to our knowledge, the only exception is Ref. 16).

4. SPIN-SOLITON ANALOGY

In spite of the apparent physical difference between these problems, a deep-rooted similarity can be observed.

I. M. Lifshits

The spin and soliton models of potential fields have many features in common.

For example, the spin-coordinate correspondence in the theory of spin systems is an analog of so-called Lax pair in the soliton theory, i.e., the soliton-coordinate correspondence. In both cases, there exists a certain associated Schrödinger equation which can be used for solution of the main problems, viz., the problem of energy spectrum (or stationary states in general) in spin systems and the Cauchy problem in soliton theory for nonlinear evolutionary Korteweg-de Vries equation. The role of a link in the spin-coordinate correspondence is played by the representation by coherent spin states, while a similar role in the soliton-coordinate correspondence is played by the Gelfand-Levitan-Marchenko integral transformation in the ISP method.

In both cases, the initial elements are discrete (spin and soliton), while the coordinate representations with one-dimensional potential fields and a certain energy matching which are put in correspondence to them are continuous. In

the spin case, we have the spin spectrum and superspin energy levels for nonlocalized potentials, while in the soliton case we have a discrete soliton spectrum for localized potentials and a continuous "supersoliton" spectrum with complete transparency. Another object in common is the integral analogy: the basic parameter of potential models in the spin case is the integer $2S+1$, while an equivalent element in the soliton case is the number of solitons N .

Finite-band potentials typical of soliton periodic (and nearly periodic) models are encountered in spin models also.

The clear-cut splitting of the energy spectrum into two parts is a common feature for spin and soliton systems: in spin systems, this is manifested in the quasi-exact solvability of the models, while in soliton systems, in reflectionless (and finite-band) potentials.

We can assume that the corresponding Schrödinger equation describes the states of some pseudo-particles, viz., "spinon" in the case of spin systems and "vrieson" in the case of soliton systems. A peculiar feature of the spinon is that a spin system can be characterized by nonlocalized as well as periodic potentials. The vrieson is distinguished by the fact that both localized and periodic potentials can correspond to a soliton system.

Furthermore, potential models in both cases are characterized by a variety of forms, several parameters, and the emergence (in addition to discrete profiles mentioned above) of analogous special potential profiles: with a fourth-order minimum, with two wells and possible location of energy levels in the critical region near the peak of the barrier separating the wells, etc. In both cases, various asymmetric models as well as periodic potentials exist along with symmetric models.

The analogy can be traced in many aspects including the introduction of new concepts (quasi-exact solvability, associated Schrödinger equation, spin-coordinate correspondence, reflectionless and finite-band potentials, pseudoparticles, etc.) which play a significant role.

In both cases, the discovery of exact solutions was an auxiliary result in basic investigations aimed at the development of new methods in the theory of spin and soliton systems. The soliton boom exploited the quantum theory to a considerable extent, but advances in soliton theory have not been reflected yet in the monographs on quantum mechanics and its applications (except Ref. 16). The same situation is observed for the problem of quasi-exact solutions and new approaches to the theory of spin systems, although we are mainly dealing with a relation between two branches of quantum mechanics. Mathematical physics and pure mathematics play an increasingly large role in quasi-exactly solvable problems,^{8,9} as was also the case with the soliton theory.

Thus, the two completely different systems supplying models with exact solutions to the quantum theory have a number of analogous properties. It would be interesting to find out whether these are purely formal analogies or a deep-rooted structural similarity.

5. CONCLUSIONS

The goal of this article will be reached if we have managed to clarify... new and unusual ideas at least partially...

I. M. Lifshits

Thus, we have traced briefly the emergence of new quantum-mechanical problems with exact solutions emerging in connection with systems of different origins (spin and soliton systems). The problems have enriched the family of potential models with simple explicit analytical expressions for energy levels and wave functions of stationary states in quantum mechanics. The new class of exact solutions is distinguished above all by a variety of potential profiles.

It is necessary to grasp many aspects of the new state-of-the-art in the problem of exact solutions (such as quasi-exact solvability, spin-soliton analogy, and structural transformations in the energy bands of spin models) and to generalize the obtained results, for example, on the basis of more complex spin and soliton systems.

The models under consideration have a clear physical meaning even at the stage of their creation since these models appeared not as a result of mathematical transformations, but as a result of analysis of specific systems (such as spin and soliton systems).

It should be noted in conclusion that quantum-

mechanical problems with exact solutions form a new actively developing trend.

The authors are extremely grateful for the opportunity to publish this material in the journal issue dedicated to I. M. Lifshits, who was both an outstanding scientist and an excellent person. This research was made by the representatives of three generations of theorists belonging to his physics school.

We are deeply indebted to V. M. Tsukernik with whom we made the first steps in the development of new methods in the theory of spin systems.

¹The epigraphs to the sections of this paper are borrowed from the works by I. M. Lifshits.^{1,2}

¹I. M. Lifshits, *Selected Works. Physics of Real Crystals and Disordered Systems* [in Russian], Nauka, Moscow (1987).

²I. M. Lifshits, *Selected Works. Electron Theory of Metals. Physics of Polymers and Biopolymers* [in Russian], Nauka, Moscow (1994).

³V. E. Zakharov, S. V. Manakov, S. P. Novikov, and L. P. Pitaevskii, *Theory of Solitons. Method of Inverse Problem* [in Russian], Nauka, Moscow (1992).

⁴V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii, *Phys. Rept.* **216**, 179 (1992).

⁵V. G. Bagrov, D. M. Gitman, I. M. Ternov *et al.*, *Exact Solutions of Relativistic Wave Equations*, Kluwer, Dordrecht (1990).

⁶I. V. Komarov, L. I. Ponomarev, and S. F. Slavyanov, *Spheroidal and Coulomb Spheroidal Functions* [in Russian], Nauka, Moscow (1976).

⁷O. B. Zaslavskii, V. V. Ulyanov, and V. M. Tsukernik, *Fiz. Nizk. Temp.* **9**, 511 (1983) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **9**, 259 (1983)].

⁸A. V. Turbiner, *Commun. Math. Phys.* **118**, 467 (1988); *Concept. Math.* **160**, 263 (1994).

⁹A. G. Ushveridze, *Fiz. Elem. Chastits At. Yadra* **20**, 1185 (1989) [*Sov. J. Particles and Nuclei* **20**, 504 (1989)].

¹⁰L. D. Landau and E. M. Lifshits, *Quantum Mechanics*, Pergamon, Oxford (1972).

¹¹S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer, Heidelberg (1971).

¹²V. M. Galitskii, B. M. Karnakov, and V. I. Kogan, *Problems in Quantum Mechanics* [in Russian], Nauka, Moscow (1981).

¹³V. V. Ulyanov, *Problems in Quantum Mechanics and Quantum Statistics* [in Russian], Vysshaya Shkola, Kharkov (1980).

¹⁴V. V. Ulyanov, *Integral Methods in Quantum Mechanics* [in Russian], Vysshaya Shkola, Kharkov (1982).

¹⁵A. M. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications* [in Russian], Nauka, Moscow (1987).

¹⁶V. V. Ulyanov, *Methods of Quantum Kinetics* [in Russian], Vysshaya Shkola, Kharkov (1987).

¹⁷O. B. Zaslavskii and V. V. Ulyanov, *Zh. Éksp. Teor. Fiz.* **87**, 1724 (1984) [*Sov. Phys. JETP* **60**, 991 (1984)].

¹⁸O. B. Zaslavskii and V. V. Ulyanov, *Tekh. Mekh. Phys.* **71**, 260 (1987).

¹⁹S. I. Chan, D. Stelman, and L. E. Thompson, *J. Chem. Phys.* **41**, 2828 (1964).

²⁰I. Kay and H. E. Moses, *J. Appl. Phys.* **27**, 1503 (1956).

²¹M. A. Shifman and A. V. Turbiner, *Commun. Math. Phys.* **126**, 347 (1989).

²²O. B. Zaslavskii, *Phys. Lett.* **A190**, 373 (1994).

²³O. B. Zaslavskii, *J. Phys.* **A27**, L447 (1994).

Translated by R. S. Wadhwa

К теории низкотемпературных свойств спиновых систем с магнитной анизотропией

О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, Ю. В. Василевская

Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

E-mail: vladimir.v.ulyanov@univer.kharkov.ua

oleg.b.zaslavskii@univer.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 28 июня 1997 г.

Рассмотрено поведение легкоосных парамагнетиков в поперечном магнитном поле в зависимости от температуры. Показано, что при низких температурах восприимчивость как функция поля обладает максимумом при всех значениях спина S . При повышении температуры от нуля этот максимум сначала не размывается, а заостряется, причем его положение меняется немонотонно. Если спин $S < 3$, то при некоторой температуре профиль восприимчивости становится двугорбым; для $S \geq 3$ получается максимум с уплощенной вершиной. Аналогичные явления характерны и для двухосных парамагнетиков. Энергетический спектр системы совпадает с $2S + 1$ низколежащими уровнями энергии для частицы, движущейся в потенциальном поле простого вида, которое для достаточно малых магнитных полей имеет вид двойной ямы. Это дает возможность вычислить скорость туннелирования методами квантовой механики.

Розглянуто поведінку легкоосних парамагнетиків у поперечному магнітному полі в залежності від температури. Показано, що при низьких температурах сприйнятливості як функція поля має максимум при всіх значеннях спіна S . При підвищенні температури від нуля цей максимум спочатку не розмивається, а загострюється, до того ж його положення змінюється немонотонно. Якщо спин $S < 3$, то при деякій температурі профіль сприйнятливості стає двогорбим; для $S \geq 3$ з'являється максимум з плоскою вершиною. Аналогічні явища характерні і для двовісних парамагнетиків. Енергетичний спектр системи збігається з $2S + 1$ низькорозташованими рівнями енергії для частинки, яка рухається в потенціальному полі простого виду, що має для досить невеликих магнітних полів вигляд подвійної ями. Це дає можливість обчислити швидкість тунелювання методами квантової механіки.

PACS: 75.10.-b, 75.10.Dg, 75.30.Gw

1. Введение

В начале 80-х годов совместно с В. М. Цукерником нами была выполнена работа по изучению квантовых свойств одноосных парамагнетиков [1]. До этого подобные системы рассматривались на основе полуклассических методов, что приводило к противоречивым результатам. Тогда же удалось не только решить поставленную задачу, но и выработать для исследования более общих спиновых систем ряд оригинальных приемов, которые были развиты в наших последующих работах [2]. Другим неожиданным важным побочным результатом было обнаружение новых классов потенциальных моделей с точными решениями уравнения Шредингера [3–5].

В обзоре 1992 года [2] нами были подытожены усилия десятилетних исследований. С тех пор

появились новые результаты и новые направления. Сюда нужно отнести в первую очередь расширение множества квазиточнорешаемых моделей [3], а также обнаружение подобных двумерных моделей и обобщение на многомерные случаи [6–7].

В данном сообщении мы приводим ряд новых результатов, полученных при исследовании анизотропных парамагнетиков. Причем предметом обсуждения будут только магнитная восприимчивость и спиновое туннелирование. Для определенности ограничимся случаем спиновых систем с гамильтонианом

$$H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 - BS_x, \quad (1)$$

описывающим так называемый двухосный парамагнетик с константами анизотропии $\alpha, \beta \geq 0$ в

перпендикулярном магнитном поле, пропорциональном B (S_j — операторы проекций спина).

2. Магнитная восприимчивость одно- и двухосных парамагнетиков

Начнем с более детального исследования влияния температуры на восприимчивость одноосного парамагнетика ($\alpha = 0$) при различных значениях спина S (без ограничения общности будем полагать также $\beta = 1$). Мы основываемся на результатах исходной работы [1], в которой обсуждаются конкретные физические объекты и размерные величины, а также введены соответствующие безразмерные характеристики, которыми и будем пользоваться в данном сообщении. В этой работе (см. также [2]) подробно исследовано поведение магнитной восприимчивости одноосного парамагнетика в основном состоянии, т.е. при температуре $T = 0$. Результат состоял в том, что магнитная восприимчивость $\chi_0 = -2\partial^2 E_0 / \partial B^2$ основного состояния в зависимости от магнитного поля в случае спина $S \geq 2$ имеет характерный ход: с ростом магнитного поля B постепенное увеличение сменяется резким возрастанием с образованием четко локализованного, ярко выраженного возвышения в виде «горба», после чего наступает быстрый спад к малым значениям в области «критического» магнитного поля $B_0 = 2S + 1$ (см. рис. 1, где для сравнения показана также восприимчивость первого возбужденного состояния).

В той же работе было дано наглядное объяснение такого явления на основе специально разработанный метода эффективного потенциала, который состоит в следующем. Поскольку спин представляет собой квантовомеханический объект существенно дискретной природы, уравнения, решение которых описывает энергетический спектр спиновых систем, имеют матричную форму. Это

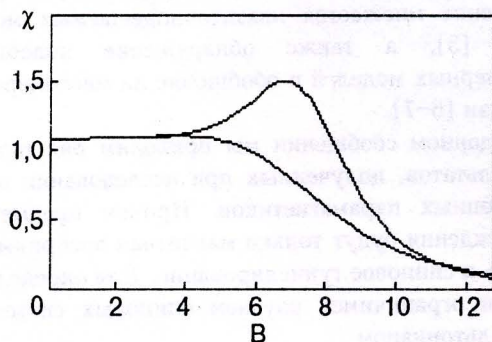


Рис. 1. Типичная зависимость восприимчивости одноосного парамагнетика от магнитного поля в основном состоянии (верхняя кривая) и первом возбужденном (нижняя кривая). Представлен случай $S = 6$.

затрудняет анализ свойств системы стандартными квантовомеханическими методами. Оказывается, однако, что для достаточно широкого класса спиновых систем можно ввести строгое потенциальное описание, так что энергетический спектр спиновой системы совпадает с некоторыми уровнями энергии для частицы, движущейся в потенциальном поле достаточно простой формы. Такое точное спин-координатное соответствие служит также основой развития различных приближенных методов описания спиновых систем, например теории возмущений и квазиклассического приближения. Особенно важно, что для соответствующей координатной системы это приводит к нахождению новых точных решений уравнения Шредингера [3–5].

Предложенный нами подход заключается в том, что для гамильтонианов, построенных из спиновых операторов, при решении задачи об их собственных значениях и собственных векторах используется представление спиновых когерентных состояний [8]. В получающемся координатном представлении такой гамильтониан становится дифференциальным оператором Шредингера с некоторой эффективной потенциальной энергией. Найденные потенциалы для простых спиновых систем либо имеют форму нелокализованных ям, либо оказываются периодическими. Во всех случаях имеются как симметричные, так и несимметричные разнообразные многопараметрические потенциальные модели.

Так, если мы решаем задачу нахождения стационарных состояний легкоосного парамагнетика в перпендикулярном магнитном поле, т.е. системы с гамильтонианом $H = -S_y^2 - BS_x$ с помощью указанного метода, то приходим к стандартному одномерному уравнению Шредингера $(d^2\psi)/(dx^2) + [E - U(x)]\psi = 0$ для псевдочастицы с квадратичным законом дисперсии (спинона), движущейся в эффективном потенциальном поле, построенном из гиперболических функций

$$U(x) = \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2 x - B(S + \frac{1}{2}) \operatorname{ch} x, \quad (2)$$

где x можно считать некоторой безразмерной координатой. При этом собственные значения энергии E спиновой системы совпадают с нижними $2S + 1$ уровнями энергии спинона в потенциальном поле (2).

Оказалось, что энергетический спектр одноосного парамагнетика имеет характерную «веерную» структуру, соответствующую деформациям эффективного потенциала (рис. 2): от двукратного вырождения при $B = 0$ с попарно близкими уров-

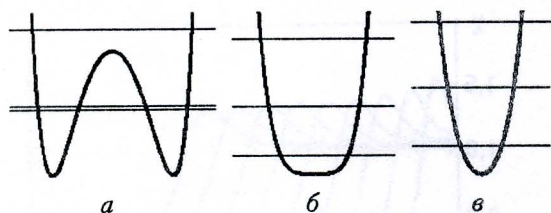


Рис. 2. Характерные формы эффективного потенциала одноосного парамагнетика.

ниями при $B \ll B_0$ (туннельное расщепление в двойной потенциальной яме — рис. 2,а) к типичному для четверного осциллятора $U \sim x^4$ расположению энергий при $B = B_0$ (рис. 2,б) и далее при $B \gg B_0$ к эквидистантной структуре спектра гармонического осциллятора $U \sim x^2$ (рис. 2,в). При этом самая существенная перестройка энергетического спектра приходится как раз на область «предкритических» полей $B \lesssim B_0$, где и расположена особенность восприимчивости в виде «горба».

Представляется интересным изучить влияние температуры на поведение восприимчивости. Оказывается, что вместо ожидаемого размытия особенности появляется любопытная трансформация «горба», грубо говоря, сводящаяся к тому, что он вначале даже «заостряется» и увеличивается и лишь потом постепенно начинает размываться, исчезая при некоторой критической температуре $T_c \sim S$. Кроме того, при не очень больших значениях спина ($S < 3$) на начальной стадии образуется двугорбый профиль (см. рис. 3), а при больших значениях спина ($S \geq 3$) получается уплощенная вершина горба (рудимент раздвоения). Положение максимума изменяется немонотонно: вначале он смещается в область больших значений магнитного поля B , а затем совершает «обратный ход» до $B = 0$ при T_c .

Некоторые типичные стадии этих метаморфоз восприимчивости представлены на рис. 4 наряду

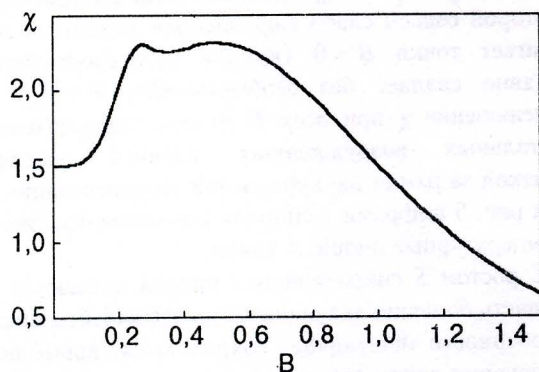


Рис. 3. Двугорбый профиль магнитной восприимчивости ($S = 3/2$, $T = 0,0028$).

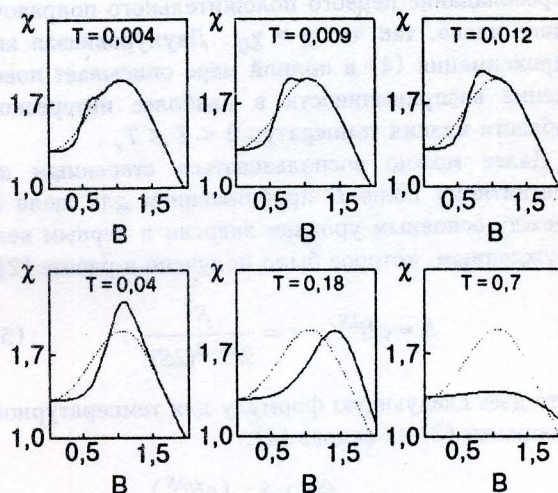


Рис. 4. Некоторые стадии низкотемпературных преобразований восприимчивости ($S = 2$).

с эталонной восприимчивостью основного состояния, обозначенной пунктиром.

Отмеченные закономерности определяются структурой энергетического спектра одноосного парамагнетика в той области магнитных полей, где расположен горб: близкое расположение основного уровня энергии и первого возбужденного при значительном удалении следующих возбужденных уровней. Так, для $S = 3$ при $B_{\max} = 2,34$ щель $E_1 - E_0 = 0,16$, тогда как $E_2 - E_1 = 3,34$.

Таким образом, в области температур $0 < T < T_c$ рассматриваемая спиновая система ведет себя как двухуровневая. Магнитную восприимчивость χ в двухуровневой аппроксимации можно записать, выделив температурную поправку $\Delta\chi$:

$$\chi = \chi_0 + \Delta\chi. \quad (3)$$

Учитывая, что уровни энергии зависят от магнитного поля, после несложных преобразований статистической суммы получаем следующую формулу для восприимчивости, содержащую основной вклад в виде восприимчивости основного состояния χ_0 и двух конкурирующих температурных поправочных членов:

$$\chi = \chi_0 + \frac{(\Delta')^2}{2T \operatorname{ch}^2(\Delta/2T)} - \frac{2\Delta''}{1 + \exp(\Delta/T)}, \quad (4)$$

где $\Delta \equiv E_1 - E_0$, а штрихи обозначают производные по B .

При $T \rightarrow 0$, как и должно быть, $\chi \rightarrow \chi_0$. При любом конечном T в области малых B , где $\Delta \ll T$, имеем $\chi = (\chi_1 + \chi_0)/2$ (χ_1 — восприимчивость первого возбужденного состояния), т.е. основной вклад дает второй отрицательный поправочный член, а с возрастанием B возможно

преобладание первого положительного поправочного члена, так что $\chi > \chi_0$. Двухуровневая аппроксимация (4) в полной мере описывает поведение восприимчивости в наиболее интересной области низких температур $0 < T < T_c$.

Далее можно воспользоваться степенным по магнитному полю B приближением для щели Δ между основным уровнем энергии и первым возбужденным, которое было получено в работе [2]:

$$\Delta \approx cB^{2S}, \quad c = \frac{S^2}{2^{2S-3}(2S)!}, \quad (5)$$

что дает следующую формулу для температурной поправки (3) на основе (4):

$$\Delta\chi = T^{(S-1)/S} f_S \left(\frac{cB^{2S}}{T} \right) \quad (6)$$

с универсальной функцией

$$f_S(x) = 2S(2S-1)c^{1/S} \frac{x^{(S-1)/S}}{\text{ch}(x/2)} \times \left[\frac{Sx}{(2S-1)\text{ch}(x/2)} - \exp(-x/2) \right]. \quad (7)$$

Сравнение такого приближения для температурной поправки к восприимчивости (6) и (7) с результатами, основанными на точных формулах для E_0 и E_1 (а также χ_0) в случае $S = 3/2; 2; 5/2; 3; 7/2$, показывает, что этим приближением достигается весьма хорошая точность в наиболее интересной области температур, где наблюдаются описанные выше трансформации профиля магнитной восприимчивости (причем для всех магнитных полей B).

Если по осям координат откладывать положение B_{\max} и величину наибольшего максимума магнит-

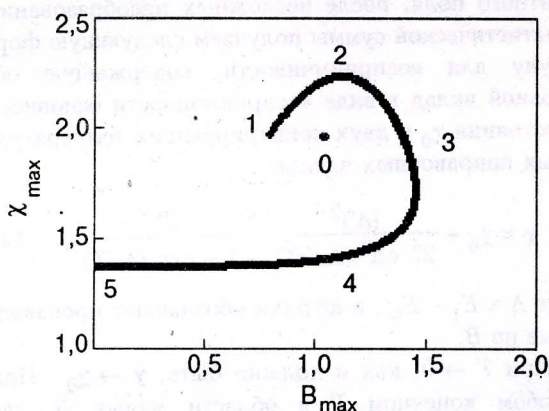


Рис. 5. Типичный виток спирали, изображающий положение и величину наибольшего максимума восприимчивости в области низких температур $0 < T < T_c$ для $S = 2$.

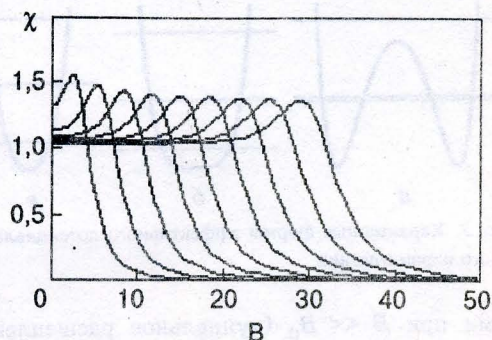


Рис. 6. Графики зависимости восприимчивости двухосного парамагнетика от магнитного поля для четных S от 4 до 20.

ной восприимчивости χ_{\max} , то при изменении температуры $0 \leq T \leq T_c$ получается кривая в виде витка спирали с отдельной точкой внутри, наглядно иллюстрирующая отмеченные выше «аномалии» поведения максимума восприимчивости — стадии его температурного «дрейфа» (см. рис. 5). В результате на шкале температур можно выделить следующие характерные области и опорные точки по отношению к превращениям профиля магнитной восприимчивости: $T_0 = 0$ — обычный одnogорбый профиль (эталонный); $T_0 \leq T \leq T_1$ — небольшие деформации левого склона горба с появлением второго (левого) максимума; T_1 — двугорбый профиль с одинаковыми значениями максимумов; $T_1 < T < T_2$ — нарастание левого горба, превосходящего эталонный, с «заострением» и перемещением его вправо; T_2 — максимальная высота горба с положением примерно на месте эталонного; $T_2 < T < T_3$ — дальнейшее смещение максимума вправо с постепенным его уменьшением; T_3 — высота уменьшается до эталонной с максимальным смещением вправо; $T_3 < T < T_4$ — перемена направления смещения (влево) и размытие; T_4 — очень размытый максимум на месте эталонного; $T_4 < T < T_5$ — слабо различимый максимум продолжает смещаться влево; $T_5 \equiv T_c$ — критическая температура, при которой совсем слабо выраженный максимум достигает точки $B = 0$ (кривая восприимчивости плавно спадает без особенностей); $T > T_c$ — уменьшение χ при всех B за счет подключения остальных возбужденных уровней энергии (выход за рамки двухуровневой аппроксимации). На рис. 5 цифрами у спирали показаны основные температурные опорные точки.

С ростом S спиралевидная кривая смещается в область больших значений B , но все качественные особенности метаморфоз сохраняются, кроме образования двугорбного профиля.

Заметим, что все расчеты велись (помимо указанных двухуровневой аппроксимации и степен-

ного приближения) на основе точных явных формул для уровней энергии в случае $S < 4$, а в случае $S \geq 4$ — на основе точных алгебраических уравнений для собственных значений гамильтониана (1). Кроме того, аналитические и численные методы взаимно контролировались и подкреплялись графическими построениями.

Другой цикл исследований посвящен изучению поведения магнитной восприимчивости двухосных парамагнетиков. Обнаружено, что все отмеченные выше особенности восприимчивости сохраняются и в этих спиновых системах. Так, на рис. 6 приведена серия типичных профилей восприимчивости для разных значений спина S в случае равных констант анизотропии $\alpha = \beta$ при $T = 0$.

Кроме того, отдельно изучена общая зависимость различных эффектов от величины отношения констант анизотропии.

Таким образом, обнаруженные ранее особенности магнитной восприимчивости анизотропных парамагнетиков оказываются весьма устойчивыми по отношению к влиянию различных факторов, обогащаясь любопытными дополнительными деталями, как при возрастании температуры T и спина S , так и при различных соотношениях между константами анизотропии α/β .

Наконец, в случае произвольно направленного магнитного поля необходим учет тензорного характера магнитной восприимчивости, т.е. детальное изучение каждой ее компоненты. Так, в одноосном случае в силу свойств симметрии имеется фактически три величины: χ_{xx} , χ_{xy} и χ_{yy} , которые следует рассматривать в зависимости от составляющих магнитного поля B_x и B_y .

3. Квантовое туннелирование в спиновых системах

В последнее десятилетие весьма интенсивно исследовались туннельные эффекты в различных областях физики твердого тела (см. обзор [9]). При этом большая часть таких исследований исходила из картины двухуровневой системы, взаимодействующей со своим окружением, которое выполняло роль термостата. Возможность приближенно заменить реальную квантовую систему с весьма сложным энергетическим спектром на двухуровневую, отбросив вклад лежащих выше уровней, означает иначе введение эффективного спина $S = 1/2$. В нашей работе, однако, мы хотели бы указать на целую область в физике туннельных явлений, в которой появление спина служит не вспомогательным средством, а отражает реальную физику задачи — туннелирование в

спиновых системах (в качестве конкретного примера можно указать туннелирование в малых ферромагнитных частицах [10]). Причем наиболее интересным здесь является случай не малых, а больших спинов $S \gg 1$.

Несмотря на то что первые указания на экспериментальные проявления спинового туннелирования фактически содержались еще в обзоре [11], теоретический аппарат для изучения рассматриваемого явления был развит только в середине 80-х годов. Это не случайно. Явление туннелирования для частицы, движущейся в потенциальной яме, было понято давно и вошло в учебники по квантовой механике. В то же время спин является существенно дискретной, чисто квантовой переменной и сам по себе столь наглядного представления не допускает. Тем более замечательно, что это оказалось возможным для спиновой системы в целом, описываемой гамильтонианом, квадратичным или квадратично-линейным по компонентам спина. Такое спин-координатное соответствие, отмеченное в предыдущих разделах статьи, позволяет перевести рассматриваемую задачу на язык обычной квантовой механики и воспользоваться уже разработанными методами — такими, как инстантонное исчисление, квазиклассическое приближение и т.д.

Рассмотрим сначала одноосный случай с анизотропией типа легкая ось, обсуждавшийся выше в другом контексте. Поскольку энергетические уровни спиновой системы совпадают, как было объяснено, с $2S + 1$ низколежащими уровнями для частицы, движущейся в потенциальном поле вида (2), то совпадают и величины туннельного расщепления $\Delta = E_1 - E_0$ энергии основного состояния. Если интересоваться вычислением этой величины с экспоненциальной точностью, то ответ может быть найден практически сразу. Как известно [12], эта величина определяется множителем $\exp(-W)$, где W — величина евклидова действия на траектории между вырожденными минимумами:

$$W = \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{2m(U - U_-)},$$

где m — эффективная масса частицы ($\hbar = 1$); $U_- = U_+$ — значение потенциала в точке минимума. Таким образом, если не интересоваться предэкспонентой, можно не находить уравнение инстантонной траектории в явном виде. Однако это необходимо для вычисления предэкспоненты:

$$\Delta = (\omega/\pi)^{1/2} A \exp(-W).$$

Здесь ω — частота, отвечающая малым колебаниям вблизи точки минимума, а константа A определяется из соотношения

$$\tau = \int_{x_m}^x dx \left[\frac{m}{2(U - U_+)} \right]^{1/2},$$

$$x(\tau) \equiv x_+ - \frac{A}{2\omega\sqrt{m}} \exp(-\omega\tau), \quad \tau \rightarrow \infty,$$

где $x_m = 0$ соответствует средней точке потенциала между двумя минимумами; τ — евклидово время. Для рассматриваемого одноосного случая с потенциалом (1) и соответствующими безразмерными величинами инстантонная траектория находится в явном виде:

$$\operatorname{th} \frac{x}{2} = \left(\frac{1 - B/B_0}{1 + B/B_0} \right)^{1/2} \operatorname{th} \frac{\omega\tau}{2}, \quad \omega = \sqrt{1 - (B/B_0)^2}.$$

Используя предыдущие формулы, находим

$$\Delta = \frac{8(S + 1/2)^{3/2} \omega^{5/2} (1 - \omega^2)^S}{\sqrt{\pi} (1 + \omega)^{2S+1}} \exp[(2S + 1)\omega]. \quad (8)$$

В случае $B \ll B_0$ формула (8) при $S \gg 1$ дает результат степенного приближения для энергетической щели (6).

Подобным же образом может быть рассмотрен и двухосный случай. С общей точки зрения он интересен тем, что энергетический спектр спинового эффективного потенциала является зонным [5]. Пусть сначала $B = 0$, а S является целым (при полуцелых значениях спина вырождение не снимается). Тогда спиновые уровни соответствуют краям слившихся зон, а расщепление основного уровня равно ширине зоны. Если же $B - S \gg 1$, то ширины энергетических зон, которым принадлежат E_0 и E_1 , оказываются много меньше, чем расстояния между уровнями, так что расщепление можно вычислить, игнорируя периодический характер потенциала и зонную структуру (подробности см. в обзоре [2], там же рассмотрено туннелирование в особых случаях, когда уровни энергии находятся вблизи максимума потенциального барьера).

Кроме того, в ряде случаев многочастичная система приближенно сводится к одночастичной — примером является гейзенберговский магнетик со слабой анизотропией [2], и для туннельного расщепления применимы формулы, полученные для парамагнетиков.

Наконец, при $B \ll B_0$ можно воспользоваться теорией возмущений. В данном случае интересно то, что вырождение снимается в $2S$ -м порядке.

Заключение

Таким образом, для изучения как низкотемпературного поведения восприимчивости анизотропных спиновых систем, так и туннельных переходов чрезвычайно результативным и наглядным оказался метод эффективного потенциала, предложенный В. М. Цукерником и получивший затем дальнейшее развитие.

Подчеркнем, что, в то время как классический спин параметризуется двумя переменными, в методе эффективного потенциала система является одномерной.

На первый взгляд, спиновые системы с гамильтонианами типа (1) казались достаточно элементарными, однако дальнейшее их изучение показало, что из задачи, предложенной В. М. Цукерником в начале 80-х годов, родилось фактически новое направление. Наша статья, как мы надеемся, еще одно тому подтверждение.

Авторы выражают глубокую благодарность и посвящают данную работу замечательному ученому и педагогу, чуткому и обаятельному человеку Виктору Моисеевичу Цукернику, вместе с которым были сделаны наши первые шаги в разработке новых методов теории спиновых систем.

1. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, В. М. Цукерник, *ФНТ* **9**, 511 (1983).
2. V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii, *Phys. Rept.* **216**, 179 (1992).
3. В. В. Ульянов, О. Б. Заславский, Ю. В. Василевская, *ФНТ* **23**, 110 (1997).
4. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, *ЖЭТФ* **87**, 1724 (1984).
5. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, *ТМФ* **71**, 260 (1987).
6. A. V. Turbinger, *Commun. Math. Phys.* **118**, 467 (1988); *Contemp. Math.* **160**, 263 (1994); А. Г. Ушверидзе, *ЭЧАЯ* **20**, 1185 (1989).
7. О. В. Zaslavskii, *Phys. Lett. A* **190**, 373 (1994); *J. Phys. A* **27**, L447 (1994).
8. А. М. Переломов, *Обобщенные когерентные состояния и их приложения*, Наука, Москва (1987).
9. A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
10. E. M. Chudnovsky and L. Gunther, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 661 (1988); *Phys. Rev. B* **37**, 9455 (1988); A. Caldeira and K. Furuya, *J. Phys. C* **21**, 1227 (1988).
11. C. P. Bean and J. D. Livingston, *J. Appl. Phys.* **30**, 120S (1959).
12. S. Coleman, *The Uses of Instantons*, in: *The Whys of Subnuclear Physics*, Plenum, New York (1979).

On the theory of low-temperature properties of spin systems with magnetic anisotropy

O. B. Zaslavskii, V. V. Ulyanov,
and Yu. V. Vasilevskaya

The temperature behaviour of easy-axis paramagnets in a transverse magnetic field is considered. It is shown that for low temperature the susceptibility as a function of field features a maximum for all values of spin S . When the temperature is increased this

maximum at first sharpens (is not smoothed out), its position changing nonmonotonically. If $S < 3$ it becomes double-humped at some temperature; for $S \geq 3$ a maximum with a flat top is obtained. Similar phenomena occur also for two-axis paramagnets. The energy spectrum of the spin system coincides with $2S + 1$ low-lying levels for a particle moving in the potential of a rather simple form. It represents a double well for a magnetic field small enough. It enables one to calculate tunneling rates using methods of quantum mechanics.

On the theory of low-temperature properties of spin systems with magnetic anisotropy

O. B. Zaslavskii, V. V. Ulyanov, and Yu. V. Vasilevskaya

*Kharkov State University, 310077 Kharkov, Ukraine**

(Submitted June 28, 1997)

Fiz. Nizk. Temp. **23**, 1289–1295 (December 1997)

Temperature behavior of easy-axis paramagnets in a transverse magnetic field is considered. It is shown that the low-temperature susceptibility as a function of the field has a peak for all values of spin S . As the temperature increases from zero, this peak is first sharpened (and not blurred), its position changing nonmonotonically. For spins $S < 3$, the peak becomes double-humped at a certain temperature, while for $S \geq 3$, a flat-top peak is observed. Similar phenomena are also typical of biaxial paramagnets. The energy spectrum of the system coincides with $2S+1$ low-lying energy levels for a particle moving in a potential field of a simple form, which has the shape of a double well for low magnetic fields. This makes it possible to calculate the tunneling velocity by using quantum-mechanical methods. © 1997 American Institute of Physics. [S1063-777X(97)00412-X]

1. INTRODUCTION

Quantum properties of uniaxial paramagnets were studied by us together with Tsukernik at the beginning of the eighties.¹ Earlier, such systems were analyzed by using semiclassical methods which led to contradictory results. We managed not only to solve the formulated problem, but also work out a number of original approaches for studying more general spin systems, which were developed in our subsequent publications.² Another unexpected and important secondary result was the discovery of a new class of potential models with exact solutions of the Schrödinger equation.^{3–5}

In a review published in 1992,² we summarized the results obtained during ten years of research. Subsequently, new results and a new trend appeared. In the first place, we must mention the extension of the manifold of quasi-exactly solvable models³ as well as the discovery of similar two-dimensional models and their generalization to multidimensional cases.^{6,7}

In this paper, we report on some new results obtained from the study of anisotropic paramagnets. We shall consider here only magnetic susceptibility and spin tunneling. For definiteness, we confine our analysis to spin systems with the Hamiltonian

$$H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 - BS_x, \quad (1)$$

describing a so-called biaxial paramagnet with anisotropy constants $\alpha, \beta \geq 0$ in a transverse magnetic field proportional to B (S_j are spin projections operators).

2. MAGNETIC SUSCEPTIBILITY OF UNIAXIAL AND BIAxIAL PARAMAGNETS

We begin with a more detailed analysis of the effect of temperature on the susceptibility of a uniaxial paramagnet ($\alpha=0$) for various values of spin S (without loss of generality, we also assume that $\beta=1$). We proceed from the results reported in our initial publication¹ in which specific

physical objects and dimensional quantities are considered, and the corresponding dimensionless parameters are introduced; we shall use these characteristics in the present research. In Ref. 1 (see also Ref. 2), the behavior of magnetic susceptibility of a uniaxial paramagnet in the ground state (i.e., at $T=0$) was studied in detail. It was found that the magnetic susceptibility $\chi_0 = -2\partial^2 E_0 / \partial B^2$ of the ground state as a function of magnetic field has a specific behavior for spin $S \geq 2$: the gradual increase in susceptibility with the magnetic field B gives way to a sharp increase with the formation of a well-localized clearly manifested peak having the shape of a "hump," followed by a rapid decrease to small values in the range of "critical" magnetic field $B_0 = 2S+1$ (see Fig. 1, where the susceptibility of the first excited state is also shown for comparison).

In the same publication, graphic explanation of such a phenomenon is given on the basis of a specially developed method of effective potential, which can be described as follows. Since spin is a quantum-mechanical object of essentially discrete nature, equations whose solutions describes the energy spectrum of spin systems have a matrix form. This complicates the analysis of properties of the system by the standard quantum-mechanical methods. It was found, however, that we can introduce a rigorous potential description for a wide class of spin systems, such that the energy spectrum of the spin system coincides with certain energy levels for a particle moving in a potential field of a simple form. Such an exact spin-coordinate correspondence also served as the basis for various approximate methods of description of spin systems, e.g., the perturbation theory and the semiclassical approximation. It is especially important that this leads to new exact solutions of the Schrödinger equation in the corresponding coordinate system.^{3–5}

The approach proposed by us lies in the application of the concept of coherent spin states for Hamiltonians constructed from spin operators used in the solution of the problem on their eigenvalues and eigenvectors.⁸ In the obtained

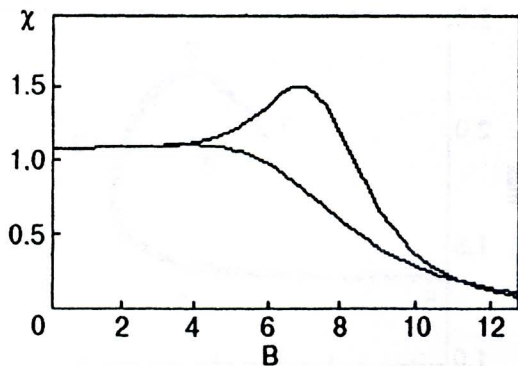


FIG. 1. Typical magnetic-field dependence of susceptibility of a uniaxial paramagnet in the ground state (upper curve) and in the first excited state (lower curve) for $S=6$.

coordinate representation, such a Hamiltonian becomes a Schrödinger differential operator with a certain effective potential energy. The potentials obtained for simple spin systems either have the shape of nonlocalized wells, or are periodic. In all cases, there exist various symmetric and nonsymmetric multiparametric potential models.

For example, if we are solving the problem on determining stationary states of an easy-axis paramagnet in a transverse magnetic field, i.e., a system with the Hamiltonian $H = -S_y^2 - BS_x$, by using the above method, we arrive at the standard one-dimensional Schrödinger equation $d^2\psi/dx^2 + [E - U(x)]\psi = 0$ for a pseudoparticle with a quadratic energy-momentum relation (spinon), moving in an effective potential field constructed from hyperbolic functions:

$$U(x) = \frac{B^2}{4} \sinh^2 x - B \left(S + \frac{1}{2} \right) \cosh x, \quad (2)$$

where x is a certain dimensionless coordinate. In this case, the eigenvalues of energy E of the spin system coincide with the lower $2S+1$ energy levels of a spinon in the potential field (2).

It was found that the energy spectrum of uniaxial paramagnet has a typical "fan" structure corresponding to deformations of effective potential (Fig. 2): from double degeneracy for $B=0$ with pairwise close energy levels for $B \ll B_0$ (tunnel splitting in a double potential well; Fig. 2a) to the energy distribution for $B=B_0$, which is typical of a fourth-degree oscillator $U \sim x^4$ (Fig. 2b), and then to an equidistant structure of the harmonic oscillator spectrum $\sim x^2$ (Fig. 2c). In this case, the most significant rearrangement of the energy

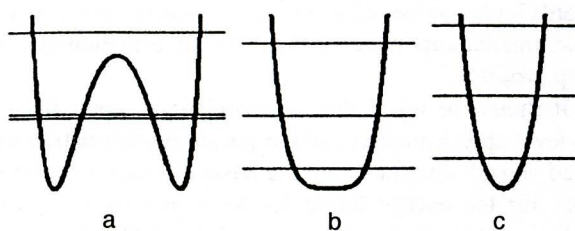


FIG. 2. Typical shapes of the effective potential of a uniaxial paramagnet.

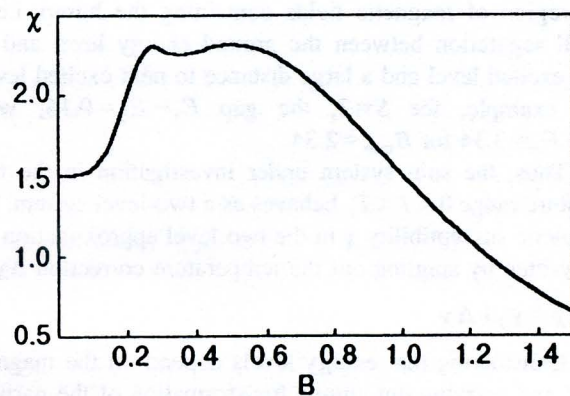


FIG. 3. Two-hump profile of magnetic susceptibility ($S=3/2$, $T=0.0028$).

spectrum is observed in the "precritical" field region $B \lesssim B_0$, in which the "hump"-type peculiarity of susceptibility is located.

It would be interesting to study the effect of temperature on the behavior of susceptibility. It turns out that, instead of expected blurring of the singularity, an interesting transformation of the "hump" takes place, which can be reduced, roughly speaking, to its "sharpening" and increase at the beginning followed by gradual blurring and vanishing at a certain critical temperature $T_c \sim S$. In addition, a two-hump profile is formed at the initial stage for not very high values of spin ($S < 3$) (Fig. 3), while for large values of spin ($S \geq 3$) the top of the hump becomes flat (rudiment doubling). The position of the peak changes nonmonotonically: at first, it is displaced towards higher values of magnetic field B , and then "starts returning" down to $B=0$ at T_c .

Some typical stages of these transformations of susceptibility are presented in Fig. 4 along with the standard susceptibility of the ground state, which is described by the dashed curve.

The above-mentioned regularities are determined by the structure of the energy spectrum of a uniaxial paramagnet in

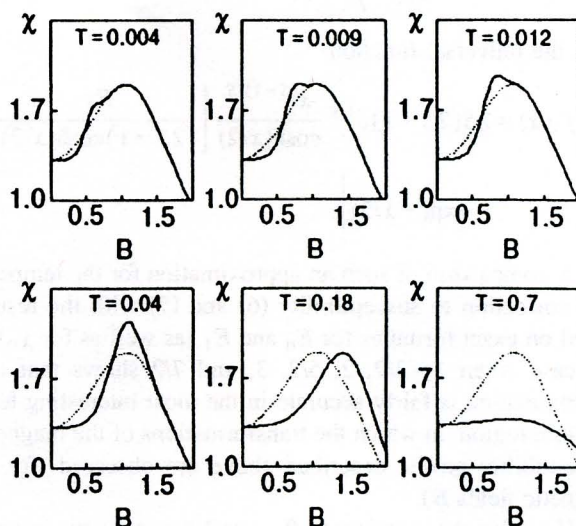


FIG. 4. Some stages of low-temperature transformations of susceptibility ($S=2$).

the region of magnetic fields containing the hump, i.e., a small separation between the ground energy level and the first excited level and a large distance to next excited levels. For example, for $S=3$, the gap $E_1 - E_0 = 0.16$, while $E_2 - E_1 = 3.34$ for $B_{\max} = 2.34$.

Thus, the spin system under investigation in the temperature range $0 < T < T_c$ behaves as a two-level system. The magnetic susceptibility χ in the two-level approximation can be written by singling out the temperature correction $\Delta\chi$:

$$\chi = \chi_0 + \Delta\chi. \quad (3)$$

Considering that energy levels depend on the magnetic field and carrying out simple transformation of the partition function, we obtain the following formula for susceptibility, which contains the main contribution in the form of the susceptibility χ_0 of the ground state and two competing temperature corrections:

$$\chi = \chi_0 + \frac{(\Delta')^2}{2T \cosh^2(\Delta/2T)} - \frac{2\Delta''}{1 + \exp(\Delta/T)}, \quad (4)$$

where $\Delta \equiv E_1 - E_0$, and primes denote derivatives with respect to B .

As $T \rightarrow 0$, $\chi \rightarrow \chi_0$ as expected. For any finite T and in the region of small B , where $\Delta \ll T$, we have $\chi = (\chi_1 + \chi_0)/2$ (χ_1 is the susceptibility of the first excited state), i.e., the main contribution comes from the second negative correction, while for higher values of B the first positive correction can dominate so that $\chi > \chi_0$. The two-level approximation (4) completely describes the behavior of susceptibility in the most interesting region of low temperatures $0 < T < T_c$.

We can now use the power approximation in the magnetic field B for the gap Δ between the ground energy level and the first excited level, which was obtained in Ref. 2:

$$\Delta = cB^{2S}, \quad c = \frac{S^2}{2^{2S-3}(2S)!}, \quad (5)$$

which leads to the following expression for the temperature correction in (3) obtained on the basis of (4):

$$\Delta\chi = T^{(S-1)/S} f_S \left(\frac{cB^{2S}}{T} \right) \quad (6)$$

with the universal function

$$f_S(x) = 2S(2S-1)c^{1/S} \frac{x^{(S-1)/S}}{\cosh(x/2)} \left[\frac{Sx}{(2S-1)\cosh(x/2)} - \exp(-x/2) \right]. \quad (7)$$

A comparison of such an approximation for the temperature correction to susceptibility (6) and (7) with the results based on exact formulas for E_0 and E_1 (as well as for χ_0) in the case when $S = 3/2, 2, 5/2, 3$, and $7/2$ shows that this approximation is fairly accurate in the most interesting temperature region, in which the transformations of the magnetic susceptibility profile described above are observed (for all magnetic fields B).

If we lay the position of B_{\max} and the magnetic susceptibility peak χ_{\max} on the coordinate axes, the variation of temperature in the range $0 \leq T \leq T_c$ leads to a curve in the

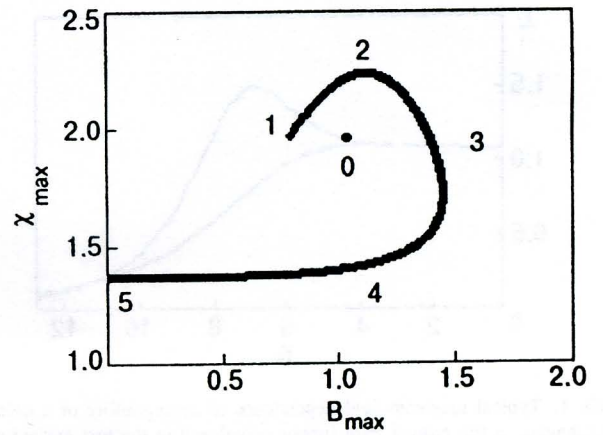


FIG. 5. A typical spiral loop describing the position and magnitude of the maximum susceptibility peak in the low-temperature region $0 < T < T_c$ for $S=2$.

form of a spiral loop with an isolated point inside it, which graphically illustrates the above “anomalies” in the behavior of the susceptibility peak, i.e., its temperature “drift” stage (see Fig. 5). The following characteristic regions and reference points relative to transformations of the magnetic susceptibility profile can be singled out on the temperature scale: $T_0 = 0$ corresponds to conventional one-hump (standard) profile; the region $T_0 \leq T \leq T_1$ is characterized by small deformations of the left slope of the hump followed by the formation of the second (left) peak; T_1 corresponds to a two-hump profile with the same height of the peaks; in the region $T_1 < T < T_2$, the left hump, which is higher than the standard one, increases, becomes sharper, and is shifted to the right; T_2 corresponds to the maximum height of the hump located approximately in the same region as the standard hump; $T_2 < T < T_3$ corresponds to further displacement of the peak to the right and its gradual decrease; at T_3 the height of the hump decreases to the standard value with the maximum displacement to the right; in the region $T_3 < T < T_4$ the displacement changes direction (to the left), and the peak is blurred; T_4 corresponds to a highly blurred peak in the region of the standard hump; $T_4 < T < T_5$ corresponds to a weakly distinguishable peak, which continues its shift to the left; $T_5 \equiv T_c$ is the critical temperature at which the weakly manifested peak reaches the point $B=0$ (the susceptibility curve descends smoothly without any singularities), and at $T > T_c$ the value of χ decreases for any B due to activation of the remaining excited energy levels (the two-level approximation becomes inapplicable). Number on the spiral in Fig. 5 indicate the main temperature reference points.

As the value of S increases, the spiral curve is shifted towards higher values of B , but all qualitative singularities of transformations are preserved (except the formation of a two-hump profile).

It should be noted that all calculations (apart from the two-level approximation and the power approximation mentioned above) were made on the basis of exact, explicit formulas for the energy levels for $S < 4$ and by using exact algebraic equations for the eigenvalues of Hamiltonian (1) for $S \geq 4$. Moreover, analytic and numerical methods were

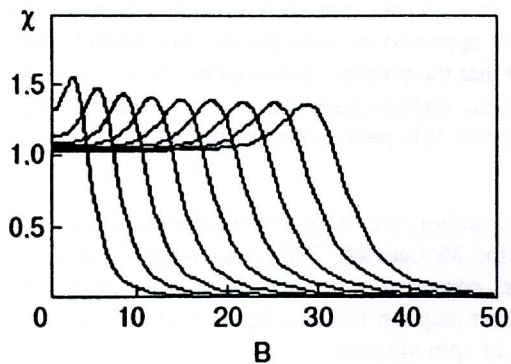


FIG. 6. Magnetic-field dependences of the susceptibility of a biaxial paramagnet for even values of S from 4 to 20.

mutually controlled and verified by plotting graphs.

Another cycle of investigations was devoted to an analysis of the behavior of the magnetic susceptibility of biaxial paramagnets. It was found that all the peculiarities of susceptibility mentioned above are observed for such systems also. For example, Fig. 6 shows a series of typical susceptibility profiles for different values of spin S in the case of equal anisotropy constants $\alpha = \beta$ at $T = 0$.

In addition, the general dependence of various effects on the ratio of anisotropy constants was studied separately.

Thus, the peculiarities in the magnetic susceptibility of anisotropic paramagnets observed earlier proved to be stable to the effect of various factors and demonstrated some additional interesting details of the behavior under an increase in temperature T and spin S as well as for different ratios α/β of anisotropy constants.

Finally, in the case of an arbitrarily directed magnetic field, the tensor nature of magnetic susceptibility must be taken into account, i.e., each of its components must be studied in detail. For example, in the uniaxial case we are actually dealing (in view of the symmetry properties) with the three quantities χ_{xx} , χ_{xy} , and χ_{yy} , which should be considered as functions of the magnetic field components B_x and B_y .

3. QUANTUM TUNNELING IN SPIN SYSTEMS

Tunnel effects in various fields of solid state physics have been studied intensely during the last decade (see the review in Ref. 9). Most of such investigations proceeded from the model of a two-level system interacting with the ambient which served as a thermostat. The possibility of replacing a real quantum-mechanical system with a complex energy spectrum by a two-level system by disregarding the contribution from higher energy levels is equivalent to the introduction of effective spin $S = 1/2$. In this publication, however, we indicate a field in the physics of tunnel phenomena, in which the spin is not an auxiliary concept, but reflects the real physics of the problem, i.e., tunneling in spin systems (by way of an example, we can mention tunneling in small ferromagnetic particles).¹⁰ The most interesting case is that of large spins $S \gg 1$ rather than the case of small spins.

In spite of the fact that first indications of experimental manifestations of spin tunneling were actually described long

ago in the review by Bean and Livingston,¹¹ the theoretical apparatus for studying this effect was worked out only by the middle of the eighties. This is not accidental. The tunneling of a particle moving in a potential well was explained long ago and is described in textbooks on quantum mechanics. At the same time, spin is an essentially discrete, purely quantum-mechanical variable and cannot be represented in such a visual form. It is remarkable that this has become possible for the spin system as a whole, that is described by a Hamiltonian which is quadratic or quadratic-linear in spin components. Such a spin-coordinate correspondence, which was mentioned in the previous sections of this paper, allows us to translate the problem under consideration into the language of ordinary quantum mechanics and to apply the methods developed earlier, including instanton calculus and semiclassical approximation.

Let us first consider first a uniaxial paramagnet with an easy-axis type anisotropy, which was discussed above for another purpose. Since the energy levels in the spin system coincide (see above) with $2S + 1$ low-lying energy levels for a particle moving in a potential field of the form (2), the magnitudes of the tunnel splitting $\Delta = E_1 - E_0$ of the ground-state energy also coincide. If we calculate this quantity to the exponential accuracy, the result can be obtained almost immediately. It is well known¹² that this value is determined by the factor $\exp(-W)$, where W is the Euclidean action on a trajectory between two degenerate minima:

$$W = \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{2m(U - U_-)}.$$

Here m is the effective mass of the particle ($\hbar = 1$), and $U_- = U_+$ is the value of the potential at the point of minimum. Thus, if we are not interested in the preexponential factor, we can forget about the equation of the instanton trajectory in explicit form. However, this is essential for calculating the preexponential factor in

$$\Delta = (\omega/\pi)^{1/2} A \exp(-W).$$

Here ω is the frequency corresponding to small oscillations near the point of minimum, and the constant A can be determined from the relation

$$\tau = \int_{x_m}^x dx \left[\frac{m}{2(U - U_+)} \right]^{1/2},$$

$$x(\tau) \cong x_+ - \frac{A}{2\omega\sqrt{m}} \exp(-\omega\tau), \quad \tau \rightarrow \infty,$$

where $x_m = 0$ corresponds to the midpoint of the potential between two minima, and τ is the Euclidean time. For the uniaxial case under consideration with potential (1) and corresponding dimensionless quantities, the instanton trajectory can be found in explicit form:

$$\tanh \frac{x}{2} = \left(\frac{1 - B/B_0}{1 + B/B_0} \right)^{1/2} \tanh \frac{\omega\tau}{2}, \quad \omega = \sqrt{1 - (B/B_0)^2}.$$

Using previous formulas, we obtain

$$\Delta = \frac{8(S+1/2)^{3/2} \omega^{5/2} (1-\omega^2)^S}{\sqrt{\pi} (1+\omega)^{2S+1}} \exp[(2S+1)\omega]. \quad (8)$$

For $B \ll B_0$, formula (8) for $S \gg 1$ gives the result in the power approximation for the energy gap (6).

The biaxial case can be considered similarly. It is interesting from the general point of view since the energy spectrum of the effective spin potential is a band spectrum.⁵ Let us first assume that $B=0$, and S is integral (for half-integral values of spin, degeneracy is not removed). In this case, spin levels correspond to the edges of merged bands, and the splitting of the ground level is equal to the band width. If, however, $B \sim S \gg 1$, the widths of the energy bands containing E_0 and E_1 are much smaller than the separation between the energy levels, so that the splitting can be calculated disregarding the periodic nature of the potential and the band structure (see for details the review in Ref. 2, in which tunneling is considered in special cases when energy levels are near the potential barrier peak).

Moreover, a many-particle system can be approximately reduced in some cases to a one-particle system (as in the case of a Heisenberg magnet with weak anisotropy),² and the formulas obtained for paramagnets are applicable for calculating the tunnel splitting.

Finally, for $B \gg B_0$, we can use perturbation theory. It is interesting that degeneracy is removed in the $2S$ th order in this case.

CONCLUSION

Thus, the method of effective potential proposed by Tsukernik and developed further by other authors proved to be extremely productive and powerful for studying the low-temperature behavior of susceptibility of anisotropic spin systems as well as for tunnel junctions.

It should be emphasized that, while the classical spin can be parametrized by two variables, in the effective potential method the system is one-dimensional.

At first glance, spin systems with a Hamiltonian of the type (1) appeared as very simple, but further analysis has proved that the problem proposed by Tsukernik at the beginning of the eighties gave rise to a new trend in physics. We believe that this publication is another confirmation of this fact.

The authors are deeply indebted and devote this research to Viktor Moiseevich Tsukernik, remarkable scientist and teacher, considerate and cordial person with whom they made first steps in the development of new methods in the theory of spin systems.

*Email: vladimir.v.ulyanov@univer.kharkov.ua;
oleg.b.zaslavskii@univer.kharkov.ua

¹O. B. Zaslavskii, V. V. Ulyanov, and V. M. Tsukernik, *Fiz. Nizk. Temp.* **9**, 511 (1983) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **9**, 259 (1983)].

²V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii, *Phys. Rep.* **216**, 179 (1992).

³V. V. Ulyanov, O. B. Zaslavskii, and Yu. V. Vasilevskaya, *Fiz. Nizk. Temp.* **23**, 110 (1997) [*Low Temp. Phys.* **23**, 82 (1997)].

⁴O. B. Zaslavskii and V. V. Ulyanov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **87**, 1724 (1984) [*Sov. Phys. JETP* **60**, 991 (1984)].

⁵O. B. Zaslavskii and V. V. Ulyanov, *Teor. Mekh. Fiz.* **71**, 260 (1987).

⁶A. V. Turbiner, *Commun. Math. Phys.* **118**, 467 (1988); *Contemp. Math.* **160**, 263 (1994); A. G. Ushveridze, *Fiz. Elem. Chast. Atom. Yadra* **20**, 1185 (1989) [*Sov. J. Part. Nucl.* **20**, 504 (1989)].

⁷O. B. Zaslavskii, *Phys. Lett. A* **190**, 373 (1994); *J. Phys. A* **27**, L447 (1994).

⁸A. M. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer, NY, 1986.

⁹A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).

¹⁰E. M. Chudnovsky and L. Gunther, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 661 (1988); *Phys. Rev. B* **37**, 9455 (1988); A. Caldeira and K. Furuya, *J. Phys. C* **21**, 1227 (1988).

¹¹C. P. Bean and J. D. Livingston, *J. Appl. Phys.* **30**, 120S (1959).

¹²S. Coleman, in *The Phys of Subnuclear Physics*, Plenum, New York (1979).

Translated by R. S. Wadhwa

Низкотемпературные свойства одноосных парамагнетиков в наклонном магнитном поле

О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, Ю. В. Василевская

Харьковский государственный университет, Украина, 310077, г. Харьков, пл. Свободы, 4

E-mail: olegzasl@aptn.kharkov.ua

vladimir.v.ulyanov@univer.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 12 февраля 1998 г., после переработки 11 марта 1998 г.

Рассмотрено поведение одноосных парамагнетиков в наклонном магнитном поле в зависимости от температуры. Найден структура энергетического спектра, а также компоненты намагниченности и восприимчивости. Получены точные формулы для спина $S = 1/2$. Для произвольных значений S в легкоосном и легкоплоскостном случаях изучены термодинамические характеристики системы в различных приближениях (малые и большие магнитные поля, низкие и сверхнизкие температуры и т.п.). Показано, что в легкоплоскостном случае при низких температурах поперечная намагниченность и продольная восприимчивость как функции магнитного поля обладают особенностями в виде серии резких всплесков, тогда как в легкоосном случае продольные компоненты этих величин обладают одиночным всплеском.

Розглянуто поведінку одноосних парамагнетиків у похилому магнітному полі в залежності від температури. Знайдено структуру енергетичного спектра, а також компоненти намагніченості та сприйнятливості. Знайдено точні формули для спіну $S = 1/2$. Для довільних значень спіну S у легкоосному та легкоплоскостному випадках вивчено термодинамічні характеристики при різних наближеннях (малі та великі магнітні поля, низькі та наднизькі температури і таке інше). Показано, що в легкоплоскостному випадку при низьких температурах поперечна намагніченість і позовжня сприйнятливість як функції магнітного поля мають особливості у вигляді серії різких сплесків, тоді як у легкоосному випадку позовжні компоненти цих величин мають поодинокий сплеск.

PACS: 75.10.-b, 75.10.Dg, 75.30.Gw

1. Введение

В различных областях физики [1,2] появляются системы, гамильтониан которых построен из операторов спина, в связи чем они получили название «спиновых». Мы рассмотрим конкретный тип таких систем со спин-гамильтонианом вида

$$H = \alpha S_z^2 - B_x S_x - B_z S_z, \quad (1)$$

встречающимся в теории магнетизма и описывающим одноосный парамагнетик в произвольно направленном магнитном поле, где S_j — проекции спина; B_j — составляющие магнитного поля; α — константа анизотропии. При изучении таких систем в обычно используемых безразмерных переменных [1,2] (в качестве безразмерной энергии вводится отношение энергии к абсолютной величине константы анизотропии, что приводит и к соответствующей безразмерной характеристике

магнитного поля B_j) фактически существен лишь знак α , так что будем в дальнейшем считать, что α принимает только два значения: $\alpha = -1$ отвечает анизотропии типа «легкая ось», а $\alpha = +1$ — «легкая плоскость».

В цикле работ [1–3] уже изучены некоторые свойства систем с гамильтонианом вида (1). При этом особое внимание уделялось случаю, когда магнитное поле перпендикулярно оси анизотропии ($B_z = 0$ и $\alpha = -1$). Другой случай с продольным магнитным полем ($B_x = 0$ и $\alpha = +1$) частично рассматривался в работах [4,5]. Здесь обсудим общий случай наклонного магнитного поля для обоих типов анизотропии ($\alpha = \pm 1$), а также сосредоточим внимание на термодинамических свойствах анизотропных парамагнетиков при низких температурах.

Обращаясь к истокам, начнем с упоминания работы [1], в которой впервые были детально

проанализированы с позиций чисто квантовой теории физические свойства одноосных парамагнетиков, правда, только в поперечном магнитном поле и при сверхнизких температурах. В [1] был разработан важный метод эффективных потенциалов, давший в дальнейшем возможность исследовать различные физические свойства одно- и двухосных парамагнетиков, а также обнаружить новые классы точных решений уравнения Шредингера [2,3,6].

Дадим некоторые предварительные пояснения. Объектом нашего исследования будут пять основных характеристик системы: две составляющие вектора намагниченности M_x и M_z и три компоненты тензора магнитной восприимчивости χ_{xx} , χ_{xz} и χ_{zz} . В стационарных состояниях, обозначаемых индексом $n = 0, 1, \dots, 2S$, эти величины связаны с соответствующими производными энергетических уровней E_n по составляющим магнитного поля B_x и B_z :

$$M_k^{(n)} = \langle S_k \rangle_n = - \langle (\partial H) / \partial B_k \rangle_n = - \frac{\partial E_n}{\partial B_k}, \quad (2)$$

$$\chi_{kl}^{(n)} = 2 \frac{\partial M_k^{(n)}}{\partial B_l} = -2 \frac{\partial^2 E_n}{\partial B_k \partial B_l} \quad (k, l = x, z). \quad (3)$$

Здесь множитель 2, введенный для удобства в работе [1], мы сохраняем для преемственности результатов.

Термодинамические величины, как нетрудно показать, выражаются через соответствующие средние значения

$$M_k^T = \overline{M_k}; \quad \chi_{kl}^T = \overline{\chi_{kl}} + \frac{1}{2T} (\overline{M_k M_l} - \overline{M_k} \overline{M_l}), \quad (4)$$

где черта сверху над некоторой величиной f означает усреднение вида

$$\overline{f} = \sum_{n=0}^{2S} f^{(n)} \exp(-E_n/T) / \sum_{n=0}^{2S} \exp(-E_n/T). \quad (5)$$

Если учесть, что имеются три внешних параметра (B_x , B_z , T) и два внутренних (S , α), то ясно, что необходимо основное внимание уделить каким-то избранным величинам, наиболее ярко и полно передающим особенности, присущие всем другим характеристикам.

2. Точные результаты в случае спина $S = 1/2$

Это уникальный случай, когда фактически совпадают два типа анизотропных парамагнетиков — легкоосный и легкоплоскостной (энергетичес-

кий спектр отличается лишь на константу, не играющую роли в изучаемых характеристиках M и χ).

Если спин равен половине, то для двух имеющихся уровней энергии получаем явные формулы

$$E_{0,1} = \alpha/4 \mp B/2, \quad B = \sqrt{B_x^2 + B_z^2},$$

так что проекции намагниченности равны

$$M_k^{(0)} = -M_k^{(1)} = \frac{B_k}{2B}, \quad \text{т.е. } M^{(0,1)} \parallel B,$$

а компоненты тензора магнитной восприимчивости имеют вид

$$\chi_{zz}^{(0)} = -\chi_{zz}^{(1)} = B_x^2/B^3, \quad \chi_{xz}^{(0)} = -\chi_{xz}^{(1)} = -B_x B_z/B^3,$$

$$\chi_{xx}^{(0)} = -\chi_{xx}^{(1)} = B_z^2/B^3.$$

Отсюда вытекают формулы для термодинамических величин

$$M_k^T = \frac{1}{2} \frac{B_k}{B} \operatorname{th} \frac{B}{2T}, \quad \chi_{zz}^T = \frac{B_x^2 \operatorname{sh}(B/T) + B_z^2(B/T)}{2B^3 \operatorname{ch}^2(B/2T)},$$

$$\chi_{xz}^T = -B_x B_z \frac{\operatorname{sh}(B/T) - (B/T)}{2B^3 \operatorname{ch}^2(B/2T)},$$

$$\chi_{xx}^T = \frac{B_z^2 \operatorname{sh}(B/T) + B_x^2(B/T)}{2B^3 \operatorname{ch}^2(B/2T)}.$$

В частности, при $B_x = 0$

$$\chi_{zz}^T = \frac{1}{2T \operatorname{ch}^2(B_z/2T)},$$

при $B_z = 0$

$$\chi_{zz}^T = \frac{1}{|B_x| \operatorname{th}(|B_x|/2T)}, \quad \chi_{xx}^T = \frac{1}{2T \operatorname{ch}^2(B_x/2T)}$$

(тогда как $\chi_{xx}^{(0)} = 0$), а при $B_x = B_z = 0$ отличные от нуля компоненты равны $\chi_{zz}^T = \chi_{xx}^T = 1/2T$.

Точные формулы для уровней энергии, намагниченности и восприимчивости получаются также и в случаях $S = 1$ и $S = 3/2$, однако они оказываются более громоздкими, поэтому мы их здесь явно не приводим, но используем в графических иллюстрациях и в качестве тестовых примеров.

3. Термодинамические величины легкоосных парамагнетиков

В случае $\alpha = -1$ главные характеристики в основном состоянии могут быть получены с помощью формулы для основного уровня энергии. Ход решения задачи разбивается на два этапа.

Вначале рассматривается система в чисто поперечном слабом магнитном поле ($B_z = 0$, $|B_x| < 1$). В этом случае структура энергетического спектра парамагнетика такова, что уровни энергии расположены парами (кроме одиночного наибольшего при целых S) вследствие расщепления за счет B_x при двукратном вырождении в отсутствие магнитного поля. Для интересующей нас пары уровней — основного и первого возбужденного — имеют место следующие формулы, дающие общий для этой пары сдвиг и энергетическую щель:

$$E_{0,1}^0 = -S^2 - \frac{S}{2(2S-1)} B_x^2 + O(|B_x|^3), \quad S > 1; \quad (6)$$

$$E_{0,1}^0 = -1 - B_x^2 + O(B_x^4), \quad S = 1,$$

$$\Delta(0) = \Delta|_{B_z=0} = E_1^0 - E_0^0 =$$

$$= \frac{S^2}{2^{2S-3}(2S)!} |B_x|^{2S} + O(|B_x|^{2S+2}). \quad (7)$$

Если первый из этих результатов непосредственно вытекает из обычной теории возмущений, то второй оказывается более тонким эффектом и получен с помощью специальной модификации теории возмущений, учитывающей конкретный вид оператора возмущения $V = -B_x S_x$ (см. [2]). Приведем также уточненное выражение для щели:

$$\Delta(0) = \frac{S^2}{2^{2S-3}(2S)!} |B_x|^{2S} \left[1 - \frac{S+1}{2(2S-1)^2} B_x^2 \right]. \quad (8)$$

Такая формула обеспечивает очень высокую точность вплоть до $|B_x| \sim \sqrt{S}$. Так, при $|B_x| = \sqrt{S/2}$ относительная ошибка не превышает 1%.

Вторым шагом является учет продольной составляющей магнитного поля B_z , усиливающей расщепление уровней. Это достигается с помощью применения специального варианта теории возмущений для близких уровней энергии [7]. Если гамильтониан системы $H = H^0 + V$, то

$$E_{0,1} = \frac{1}{2} (E_0^0 + E_1^0) \mp \frac{1}{2} \sqrt{(E_0^0 - E_1^0)^2 + 4|V_{01}|^2}, \quad (9)$$

где учтено, что в нашем случае возмущение $V = -B_x S_x$ имеет строго равные нулю диагональные матричные элементы в представлении невозмущенного гамильтониана $H^0 = -S_z^2 - B_x S_x$, а недиагональные элементы $V_{01} = -B_x \langle 0 | S_x | 1 \rangle$ могут быть найдены также с помощью теории возмущений:

$$|\langle 0 | S_x | 1 \rangle|^2 \approx S^2 \left[1 - \frac{1}{(2S-1)^2} B_x^2 \right], \quad S > 1/2. \quad (10)$$

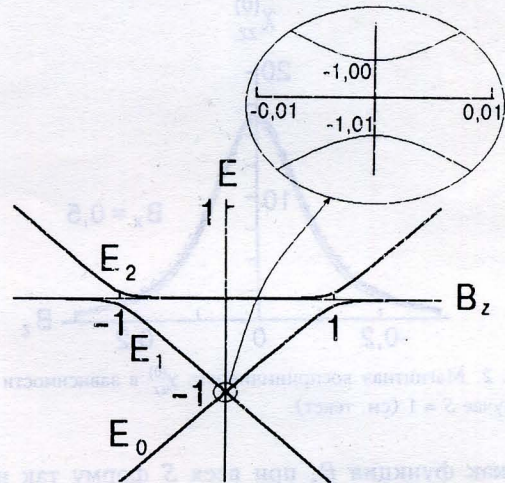


Рис. 1. Структура энергетического спектра легкоосного парамагнетика при $B_x = 0,1$ в случае $S = 1$ (E_i — уровни энергии).

Таким образом, для $|B_x| \ll 1$ приходим на основе (8), (9) и (10) к важному для дальнейшего результату «симметричного отталкивания» (рис. 1) основного и первого возбужденного уровней:

$$E_{0,1} = -S^2 - \frac{S}{2(2S-1)} B_x^2 \mp \frac{\Delta}{2}, \quad S > 1, \quad (11)$$

где отброшены члены более высокого порядка малости по B_x и B_z , а энергетическая щель в первом приближении дается формулой

$$\Delta = \sqrt{\Delta(0)^2 + 4S^2 B_z^2} \quad (12)$$

с $\Delta(0)$ из (7). Более точное выражение для Δ получаем на основе (8) и с заменой в (12) множителя при $4B_z^2$ на $S^2 - S^2 B_x^2 / (2S-1)^2$ в соответствии с (10). Заметим, что в дальнейших расчетах для краткости формула (12) будет фигурировать явно, хотя нужно иметь в виду, что она может быть уточнена указанным выше образом. Переходя к магнитным характеристикам основного состояния, получаем из (11) и (12) намагниченность

$$M_z^{(0)}(B_z) = \frac{2S^2 B_z}{\sqrt{\Delta(0)^2 + 4S^2 B_z^2}} \quad (13)$$

и восприимчивость

$$\chi_{zz}^{(0)}(B_z) = \frac{4S^2 \Delta(0)^2}{[\Delta(0)^2 + 4S^2 B_z^2]^{3/2}} \quad (14)$$

(другие компоненты мы не выписываем). Отсюда вытекают следующие выводы. Во-первых, при $S = 1/2$ эти результаты совпадают с точными. Во-вторых, компонента восприимчивости $\chi_{zz}^{(0)}$ име-

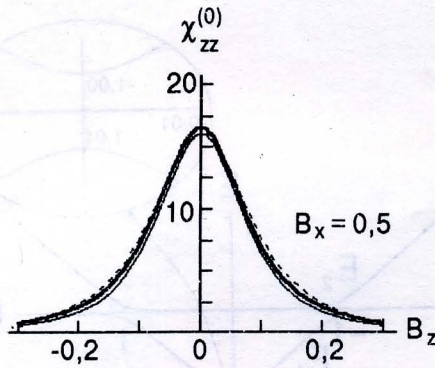


Рис. 2. Магнитная восприимчивость $\chi_{zz}^{(0)}$ в зависимости от B_z в случае $S = 1$ (см. текст).

ет как функция B_z при всех S форму так называемого двумерного распределения Стюдента. В-третьих, при $B_z \rightarrow 0$ с учетом поправок

$$\chi_{zz}^{(0)}(0) = \frac{2^{2S-1}(2S)!}{|B_x|^{2S}} \left[1 + \frac{S-1}{2(2S-1)^2} B_x^2 \right], \quad S > 1/2.$$

Типичный профиль этой компоненты восприимчивости приведен на рис. 2 при $B_x = 0,5$ в случае $S = 1$, где нанесены практически сливающиеся точная кривая (жирная), приближенная по формуле (14) (пунктирная) и уточненное приближение (тонкая), иллюстрирующие эффективность используемых приближений.

Переходя к термодинамическим величинам, отметим, что полученные результаты для основного состояния отвечают сверхнизким температурам $T \ll \Delta$, при которых вклад возбужденных состояний во все термодинамические величины экспоненциально мал. Однако роль этих результатов не исчерпывается сказанным, поскольку при $T \ll 2S - 1$ уже пара низколежащих уровней отделена от остальных, так что вклад во все термодинамические величины вносят только основное и первое возбужденное состояния, а уже второе и последующие возбужденные состояния дают экспоненциально малые поправки. Такие температуры будем называть низкими, а соответствующее приближение — двухуровневым.

Воспользовавшись формулами «симметричного отталкивания» (11) для основного и первого возбужденного уровней, замечаем, что в первом возбужденном состоянии $M_z^{(1)}$ и $\chi_{zz}^{(1)}$ и $\chi_{xz}^{(1)}$ отличаются только знаком от соответствующих величин основного состояния. Следовательно, из (2)–(4) вытекает, что

$$M_z^T = M_z^{(0)} \operatorname{th} \frac{\Delta}{2T},$$

$$\chi_{zz}^T = \chi_{zz}^{(0)} \operatorname{th} \frac{\Delta}{2T} + \frac{(M_z^{(0)})^2}{2T \operatorname{ch}^2 (\Delta/2T)}. \quad (15)$$

Подобные формулы получаются и для M_x^T , χ_{xx}^T и χ_{xz}^T , причем влияние температуры аналогично влиянию B_x . Как в первом, так и во втором случаях острые всплески χ_{zz} сглаживаются, уширяясь и уменьшаясь в центре.

Чтобы представить себе полную картину изменения $\chi_{zz}^{(0)}$ в зависимости от магнитного поля, необходимо рассматривать эту величину как функцию переменных B_x и B_z , т.е. как поверхность над плоскостью (B_x, B_z) . Нам будет удобнее, однако, рассматривать сечения этой поверхности $\chi_{zz}^{(0)}(B_z)$ при некоторых фиксированных значениях B_x . Другими словами, при постоянной поперечной составляющей B_x брать изменения продольной составляющей B_z .

Найденные формулы и соответствующие иллюстрации дают полное представление о поведении изучаемых характеристик в малых магнитных полях. В больших же полях намагниченность достигает насыщения и восприимчивости быстро убывают. Приведем результаты расчетов и в этом случае, считая в гамильтониане $H = -B_x S_x - B_z S_z - S_z^2$ первые два члена основными, а член магнитной анизотропии учитываем как поправку. При этом удобно выбрать оси координат таким образом, чтобы одна из них была направлена вдоль магнитного поля. В таком случае гамильтониан принимает вид $H = -B S_z - \cos^2 \varphi S_z^2 + \cos \varphi \sin \varphi (S_x' S_z' + S_z' S_x') - \sin^2 \varphi S_x'^2$, где $\cos \varphi = B_z/B$; $\sin \varphi = B_x/B$; $B = (B_x^2 + B_z^2)^{1/2}$. Первый член является основным, остальные служат возмущающими поправками. Применение теории возмущений дает с учетом квадратичных поправок для основного уровня энергии

$$E_0 = -BS - S^2 \cos^2 \varphi - \frac{S}{2} \sin^2 \varphi + O(B^{-1}) = -S \sqrt{B_x^2 + B_z^2} - S^2 + S \left(S - \frac{1}{2} \right) \frac{B_x^2}{B_x^2 + B_z^2} + O(B^{-1}).$$

Отсюда, вычисляя магнитный момент

$$M_z^{(0)} = \frac{S B_z}{(B_x^2 + B_z^2)^{1/2}} + S(2S-1) \frac{B_x^2 B_z}{(B_x^2 + B_z^2)^2} + O\left(\frac{1}{B^2}\right),$$

$$M_x^{(0)} = \frac{S B_x}{(B_x^2 + B_z^2)^{1/2}} - S(2S-1) \frac{B_z^2 B_x}{(B_x^2 + B_z^2)^2} + O\left(\frac{1}{B^2}\right),$$

получаем компоненту магнитной восприимчивости

$$\chi_{zz}^{(0)} = \frac{2S B_x^2}{(B_x^2 + B_z^2)^{3/2}} + 2S(2S-1) \frac{B_x^2(B_x^2 - 3B_z^2)}{(B_x^2 + B_z^2)^3} + O\left(\frac{1}{B^3}\right),$$

в частности,

$$\chi_{zz}^{(0)}|_{B_z=0} = \frac{2S}{|B_x|} + \frac{2S(2S-1)}{B_x^2} + O\left(\frac{1}{|B_x|^3}\right).$$

Другая компонента тензора восприимчивости равна

$$\chi_{xx}^{(0)} = \frac{2S B_z^2}{(B_x^2 + B_z^2)^{3/2}} - 2S(2S-1) \frac{B_z^2(B_z^2 - 3B_x^2)}{(B_x^2 + B_z^2)^3} + O\left(\frac{1}{B^3}\right),$$

так что

$$\chi_{xx}^{(0)}|_{B_z=0} = O\left(\frac{1}{|B_x|^3}\right).$$

Кроме того,

$$\chi_{xx}^{(0)}|_{B_x=0} = \frac{2S}{|B_z|} - \frac{2S(2S-1)}{B_z^2} + O\left(\frac{1}{|B_z|^3}\right).$$

Наконец,

$$\chi_{xz}^{(0)} = -\frac{2S B_x B_z}{(B_x^2 + B_z^2)^{3/2}} - 4S(2S-1) B_x B_z \frac{B_x^2 - B_z^2}{(B_x^2 + B_z^2)^3} + O\left(\frac{1}{B^3}\right).$$

Аналогичные результаты получаются в больших магнитных полях и в легкоплоскостном случае (см. далее), отличаясь только знаком поправок.

4. Термодинамические величины легкоплоскостных парамагнетиков

Как и при рассмотрении легкоосного случая, в основе результатов для легкоплоскостных парамагнетиков ($\alpha = +1$) также лежит формула для симметричного расщепления уровней энергии основного состояния, однако теперь имеется серия точек на оси B_z , для которых при $B_x = 0$ образуются «стыки» в энергетическом спектре.

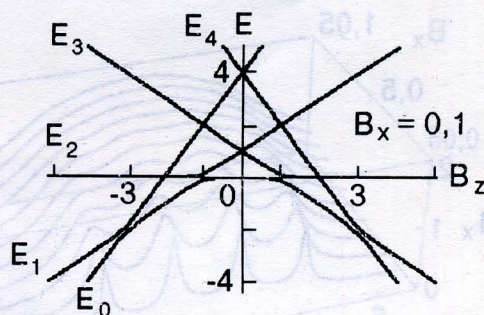


Рис. 3. Типичная структура энергетического спектра легкоплоскостного парамагнетика в наклонном магнитном поле ($S = 2$).

Собственные значения гамильтониана невозмущенной задачи в чисто продольном магнитном поле $H_0 = S_z^2 - B_z S_z$ могут классифицироваться по представлению S_z , что приводит к излому характера энергетического спектра [4]. При небольших значениях поперечной составляющей магнитного поля $|B_x| \ll 1$ сетка уровней слегка деформируется, так что в местах стыков с двукратным вырождением возникают просветы (это иллюстрирует график, приведенный на рис. 3 для случая $S = 2$ и $|B_x| = 0,1$), хорошо описываемые теорией возмущений для двукратного вырождения (в точках стыков) или для близких уровней энергии (в окрестностях этих точек).

Для основного и первого возбужденного уровней энергии точкам стыка соответствуют значения $B_z = B_m$, где в случае S целых

$$B_m = 2m - 1, \quad c_m = (S + m)(S - m + 1), \quad m = -S + 1, -S + 2, \dots, S - 1, S, \quad (16)$$

а в случае S полуцелых

$$B_m = 2m, \quad c_m = (S + 1/2)^2 - m^2, \quad m = -S + 1/2, -S + 3/2, \dots, S - 3/2, S - 1/2.$$

Вблизи каждой точки B_m , пользуясь результатом теории возмущений в случае двукратного вырождения или близких уровней энергии, получаем локальные формулы: в случае S целых имеем

$$E_{0,1} = m^2 - m + 1/2 - (m - 1/2)B_z \mp \frac{1}{2} \sqrt{c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2}, \quad (18)$$

а в случае S полуцелых

$$E_{0,1} = m^2 - 1/4 - m B_z \mp \frac{1}{2} \sqrt{c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2}. \quad (19)$$

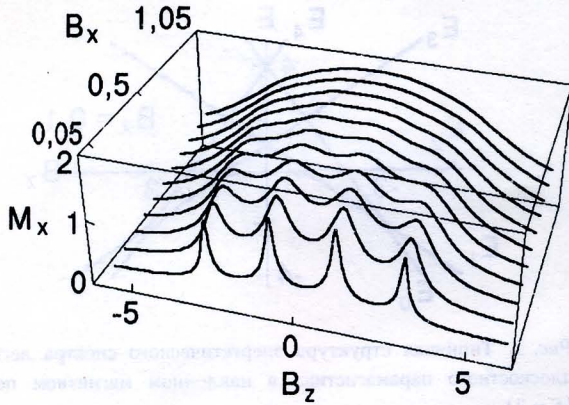


Рис. 4. Поведение намагниченности легкоплоскостного парамагнетика в зависимости от магнитного поля в случае $S = 1$.

Важно подчеркнуть, что основную роль в дальнейшем применении полученных формул для низлежащих уровней энергии будет играть корневой член в (18) и (19), в связи с чем будем говорить о результатах (18) и (19) как о симметричном расщеплении. Добавим также, что результаты (18) и (19) представляют самостоятельный интерес в связи с проблемой спинового туннелирования [8, 9], где основным предметом исследования является именно расщепление уровней энергии.

Рассмотрим намагниченность в основном состоянии $M_x^{(0)}$ как функцию продольного магнитного поля B_z при различных значениях поперечной составляющей B_x . В соответствии с формулами симметричного расщепления (18) и (19) для основного уровня энергии при малых значениях $|B_x| \ll 1$ в окрестности значений $B_z = B_m$ со степенями этого уровня энергии с первым возбужденным искомым значением $M_x^{(0)} = -\partial E_0 / \partial B_x$ равна

$$M_x^{(0)}(B_z) = \frac{1}{2} \frac{c_m B_x}{(c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2)^{1/2}}, \quad |B_z - B_m| < 1, \quad (20)$$

где B_m и c_m определяются выражениями (16) и (17).

Количество всплесков $M_x^{(0)}$ на всей оси B_z равно $2S$. Каждый пик имеет характерную заостренную форму с максимумом $\sqrt{c_m}/2$ в точках $B_z = B_m$ и шириной $\sim \sqrt{c_m} |B_x|$, так что центральные всплески несколько выше и шире периферийных. В частности, в случае полуцелых S высота наибольшего (центрального) пика составляет $1/2 (S + 1/2)$, а наименьшего равна $\sqrt{S/2}$ (в случае целых S соответственно $1/2 \sqrt{S(S+1)}$ и $\sqrt{S/2}$). Поскольку расстояние между максимумами на оси B_z равно 2, с увеличением $|B_x|$ они предрасположены к

наложению и слиянию с образованием вначале формы в виде «короны», которая при дальнейшем увеличении $|B_x|$ приобретает колоколообразный профиль. Это хорошо видно на серии графиков, представленных на рис. 4 для спина $S = 2$.

Вторым примером служит компонента магнитной восприимчивости $\chi_{zz}^{(0)}$ в зависимости от B_z при различных значениях B_x . Аналогично $M_x^{(0)}$ эта величина также получается на основе формулы симметричного расщепления и, будучи связанной с энергией соотношением $\chi_{zz}^{(0)} = -2\partial^2 E_0 / \partial B_z^2$, в окрестности изломов равна

$$\chi_{zz}^{(0)}(B_z) = \frac{c_m B_x^2}{[c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2]^{3/2}}, \quad |B_z - B_m| < 1, \quad (21)$$

где величины B_m и коэффициенты c_m те же, что и в формуле (20).

Во многих отношениях свойства магнитной восприимчивости подобны таковым для намагниченности, однако есть и существенные отличия. Так, в силу более быстрого убывания при удалении от точек излома B_m (по закону двумерного распределения Стюдента) всплески оказываются острее, а аппроксимация (21) хорошо перекрывает не только окрестности изломов B_m , но и промежутки между этими точками, где происходит наложение всплесков. При этом можно использовать «глобальное» представление для $\chi_{zz}^{(0)}$ в виде формулы суммирования

$$\chi_{zz}^{(0)}(B_z) = \sum_{m=m_1}^{m_2} \frac{c_m B_x^2}{[c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2]^{3/2}},$$

где в случае S целых $m_1 = -S + 1$; $m_2 = S$, а в случае S полуцелых $m_1 = -S + 1/2$; $m_2 = S - 1/2$. Для $\chi_{zz}^{(0)}$ высота всплесков $1/(\sqrt{c_m} |B_x|)$ уменьшается с ростом $|B_x|$ (при той же ширине $\sqrt{c_m} |B_x|$), и более высокие пики расположены в центре, а не на периферии. Соответствующие иллюстрации приведены на рис. 5. Влияние температуры в основном такое же, как и в легкоосном случае, описывается формулами типа (15) и иллюстрируется графиками, приведенными на рис. 6 и 7.

5. Заключение

Разнообразие величин и частных случаев все же позволяет сделать некоторые общие выводы о поведении рассматриваемых систем в целом. Главное состоит в том, что все отмеченные особенности физических характеристик наблюдаются в области небольших значений поперечной составляющей магнитного поля, когда происходит су-

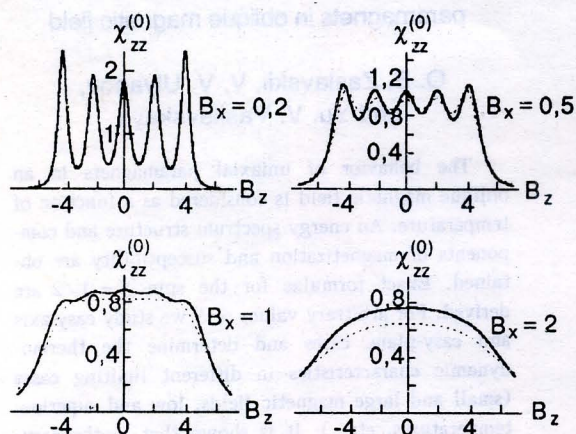


Рис. 5. Зависимость восприимчивости легкоплоскостного парамагнетика от поперечной составляющей магнитного поля B_x в случае $S = 5/2$ (пунктирная линия — приближение симметричного расщепления).

существенная перестройка энергетического спектра. При больших же значениях магнитного поля намагниченность достигает насыщения, а восприимчивость становится ничтожно малой.

При этом существенную роль играет тип магнитной анизотропии, т.е. знак константы α . На языке восприимчивости имеем в случае $\alpha = -1$ одиночные всплески, а в случае $\alpha = +1$ — систему $2S$ всплесков. Все многообразие объединяется универсальностью форм, например в виде двумерного распределения Стюдента для χ_{zz} .

Влияние температуры сводится к некоторому сглаживанию или размыванию пиков. В случае чисто продольного поля точечные особенности восприимчивости в виде δ -функций сменяются всплесками конечной высоты и ширины. Аналогичным образом в случае спина $S = 1/2$ восприимчивость χ_{xx} в поперечном магнитном поле при

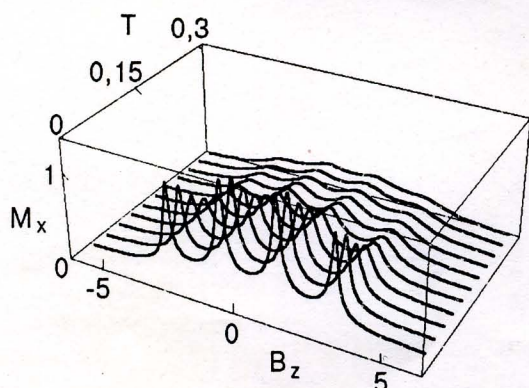


Рис. 6. Влияние температуры на поведение намагниченности легкоплоскостного парамагнетика при $B_x = 0,1$ в случае $S = 2$.

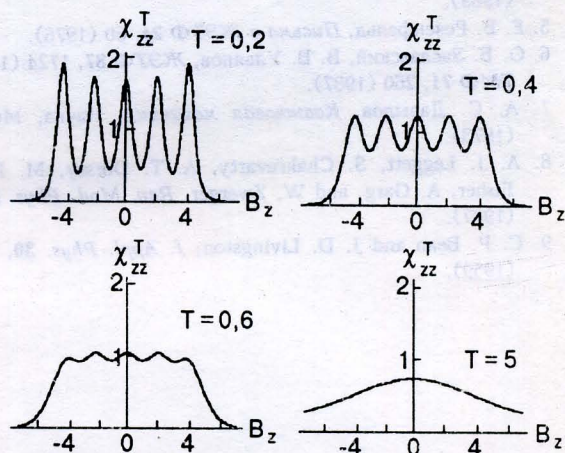


Рис. 7. Влияние температуры на всплески магнитной восприимчивости легкоплоскостного парамагнетика при $B_x = 0,2$ в случае $S = 5/2$.

конечной температуре становится отличной от нуля. Заметим также, что наклон магнитного поля, т.е. появление поперечной составляющей B_x , влияет на форму χ_{zz} подобно температуре.

Еще раз подчеркнем, что для описания низкотемпературных свойств рассмотренных анизотропных парамагнетиков в наиболее интересной области магнитных полей фактически достаточно знать поведение основного уровня энергии.

Для краткости приводим лишь основные результаты и опускаем достаточно громоздкие формулы, стараясь компенсировать это графическими иллюстрациями.

Добавим несколько замечаний о методике расчетов. Изучение физических свойств одноосных парамагнетиков опиралось, во-первых, на аналитические точные и разного рода приближенные вычисления, во-вторых, на компьютерные аналитические и численные расчеты, а также графические построения. Эти подходы взаимно контролируют и дополняют друг друга. При этом часто именно графический метод служит стимулом аналитических расчетов, являясь аналогом физического эксперимента.

Авторы выражают глубокую благодарность В. М. Цукернику, вместе с которым были сделаны наши первые шаги в теории спиновых систем.

Данную работу мы посвящаем А. М. Косевичу, чье служение науке является для нас образцом.

1. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, В. М. Цукерник, *ФНТ* 9, 511 (1983).
2. V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii, *Phys. Rept.* 216, 179 (1992).
3. В. В. Ульянов, О. Б. Заславский, Ю. В. Василевская, *ФНТ* 23, 110 (1997).

4. Л. Д. Филатова, В. М. Цукерник, *ЖЭТФ* **56**, 1290 (1969).
5. Е. В. Розенфельд, *Письма в ЖЭТФ* **24**, 60 (1976).
6. О. Б. Заславский, В. В. Ульянов, *ЖЭТФ* **87**, 1724 (1984); *ТМФ* **71**, 260 (1987).
7. А. С. Давыдов, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1973).
8. A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
9. C. P. Bean and J. D. Livingston, *J. Appl. Phys.* **30**, 120S (1959).

Low-temperature properties of uniaxial paramagnets in oblique magnetic field

O. B. Zaslavskii, V. V. Ulyanov,
and Yu. V. Vasilevskaya

The behavior of uniaxial paramagnets in an oblique magnetic field is considered as a function of temperature. An energy spectrum structure and components of magnetization and susceptibility are obtained. Exact formulae for the spin $S = 1/2$ are derived. For arbitrary values of S we study easy-axis and easy-plane cases and determine the thermodynamic characteristics in different limiting cases (small and large magnetic fields, low and superlow temperatures, etc.). It is shown that in the easy-plane case for low temperatures the transverse magnetization and longitudinal susceptibility as functions of magnetic field strength exhibit a series of sharp splashes whereas in the easy-axis case the longitudinal components of these quantities have only a single splash.



LOW-TEMPERATURE MAGNETISM

Low-temperature properties of uniaxial paramagnets in a tilted magnetic field

O. B. Zaslavskii, V. V. Ulyanov, and Yu. V. Vasilevskaya

*Physics Department, Kharkov State University, 310077 Kharkov, Ukraine**

(Submitted February 12, 1998; revised March 11, 1998)

Fiz. Nizk. Temp. **24**, 627–634 (July 1998)

The behavior of uniaxial paramagnets in a tilted magnetic field is considered as a function of temperature. The structure of the energy spectrum as well as magnetization and susceptibility components are determined. Exact formulas for the spin $S = 1/2$ are obtained. Thermodynamic parameters of the system are studied for arbitrary values of S in an easy-axis and easy-plane cases in different approximations (weak and strong magnetic fields, low and ultralow temperatures, etc.). It is shown that in the easy-plane case, the transverse magnetization and longitudinal susceptibility as functions of magnetic field at low temperatures exhibit peculiarities in the form of a series of sharp spikes, while the longitudinal components of these quantities in the easy-axis case display only a single spike. © 1998 American Institute of Physics. [S1063-777X(98)00407-1]

1. INTRODUCTION

In various branches of physics,^{1,2} one frequently encounters systems whose Hamiltonian is constructed from spin operators and which are therefore called “spin systems.” We shall consider a specific type of such systems with a spin Hamiltonian of the form

$$H = \alpha S_z^2 - B_x S_x - B_z S_z, \quad (1)$$

appearing in the theory of magnetism and describing a uniaxial paramagnet in an arbitrarily directed magnetic field, where S_j is the spin component, B_j the magnetic field components, and α the anisotropy constant. When such systems are studied in conventional dimensionless variables (the dimensionless energy is introduced as the ratio of energy to the magnitude of anisotropy constant, which also leads to the corresponding dimensionless characteristic of the magnetic field B_j),^{1,2} only the sign of α is actually important. For this reason, we shall henceforth consider that α assumes only two values: $\alpha = -1$ corresponds to the easy-axis type of anisotropy, while $\alpha = +1$ corresponds to the easy-plane anisotropy.

Some properties of the systems of the type (1) have already been investigated.^{1–3} Special attention was paid to the case when the magnetic field is perpendicular to the anisotropy axis ($B_z = 0$ and $\alpha = -1$). The other case with a longitudinal magnetic field ($B_x = 0$ and $\alpha = +1$) was partly considered in Refs. 4 and 5. We shall consider here the general case of a tilted magnetic field for both types of anisotropy ($\alpha = \pm 1$) and pay special attention to the thermodynamic properties of anisotropic paramagnets at low temperatures.

Turning to the origin of the problem, we must refer the reader to our earlier publication¹ in which the physical properties of uniaxial paramagnets were analyzed in detail purely from the standpoint of the quantum theory, though only in a

transverse magnetic field at ultralow temperatures. In Ref. 1, an important method of effective potentials was developed. This method was subsequently used for studying various physical properties of uniaxial and biaxial paramagnets and to discover new classes of exact solutions of the Schrödinger equation.^{2,3,6}

Some preliminary remarks are appropriate here. We shall study five main parameters of the system: two components of the magnetization vector (M_x and M_z) and three components of the magnetic susceptibility tensor χ_{xx} , χ_{xz} , and χ_{zz} . In stationary states marked by the subscript $n = 0, 1, \dots, 2S$, these quantities are connected with the relevant derivatives of energy levels E_n with respect to the magnetic field components B_x and B_z :

$$M_k^{(n)} = \langle S_k \rangle_n = - \langle (\partial H) / \partial B_k \rangle_n = - \frac{\partial E_n}{\partial B_k}, \quad (2)$$

$$\chi_{kl}^{(n)} = 2 \frac{\partial M_k^{(n)}}{\partial B_l} = - 2 \frac{\partial^2 E_n}{\partial B_k \partial B_l} \quad (k, l = x, z). \quad (3)$$

The factor 2 introduced for convenience in Ref. 1 will be preserved for matching the results.

It can be easily proved that thermodynamic quantities can be expressed in terms of corresponding mean values:

$$M_k^T = \bar{M}_k, \quad \chi_{kl}^T = \overline{\chi_{kl}} + \frac{1}{2T} (\overline{M_k M_l} - \bar{M}_k \bar{M}_l), \quad (4)$$

where the bar over a certain quantity f indicates averaging of the type

$$\bar{f} = \sum_{n=0}^{2S} f^{(n)} \exp(-E_n/T) / \sum_{n=0}^{2S} \exp(-E_n/T). \quad (5)$$

Taking into account the fact that we are dealing with three extrinsic parameters (B_x, B_z, T) and two intrinsic

parameters (S, α), we must clearly pay special attention to certain selected quantities that reflect peculiarities typical of all other parameters most clearly and comprehensively.

2. EXACT RESULTS FOR SPIN $S=1/2$

This is a unique case, when two types of anisotropic paramagnets (easy-axis and easy plane) actually coincide (the energy spectra differ only by a constant that does not play any role in the characteristics \mathbf{M} and $\hat{\chi}$ under investigation).

If the spin is equal to $1/2$, we obtain two simple explicit formulas for the two available energy levels,

$$E_{0,1} = \alpha/4 \mp B/2, \quad B = \sqrt{B_x^2 + B_z^2},$$

so that the magnetization components are given by

$$M_k^{(0)} = -M_k^{(1)} = \frac{B_{k*}}{2B}, \quad \text{i.e. } \mathbf{M}^{(0,1)} \parallel \mathbf{B},$$

while the magnetic susceptibility tensor components have the form

$$\chi_{zz}^{(0)} = -\chi_{zz}^{(1)} = B_x^2/B^3, \quad \chi_{xz}^{(0)} = -\chi_{xz}^{(1)} = -B_x B_z/B^3, \\ \chi_{xx}^{(0)} = -\chi_{xx}^{(1)} = B_z^2/B^3.$$

This leads to the following expressions for thermodynamic quantities:

$$M_k^T = \frac{1}{2} \frac{B_k}{B} \tanh \frac{B}{2T}, \quad \chi_{zz}^T = \frac{B_x^2 \sinh(B/T) + B_z^2 (B/T)}{2B^3 \cosh^2(B/2T)}, \\ \chi_{xz}^T = -B_x B_z \frac{\sinh(B/T) - (B/T)}{2B^3 \cosh^2(B/2T)}, \\ \chi_{xx}^T = \frac{B_z^2 \sinh(B/T) + B_x^2 (B/T)}{2B^3 \cosh^2(B/2T)}.$$

For example, we have

$$\chi_{zz}^T = \frac{1}{2T \cosh^2(B_z/2T)}$$

for $B_x = 0$,

$$\chi_{zz}^T = \frac{1}{|B_x| \tanh(|B_x|/2T)}, \quad \chi_{xx}^T = \frac{1}{2T \cosh^2(B_x/2T)}$$

for $B_z = 0$, while for $B_x = B_z = 0$, the nonzero components are $\chi_{zz}^T = \chi_{xx}^T = 1/(2T)$.

The exact formulas for energy levels, magnetization, and susceptibility can also be obtained for $S=1$ and $S=3/2$, but these formulas are more cumbersome and will not be given in explicit form. We shall use them in graphic illustrations and as test examples.

3. THERMODYNAMIC PARAMETERS OF EASY-AXIS PARAMAGNETS

For $\alpha = -1$, the main parameters in the ground state can be obtained by using the formula for the ground energy level. The algorithm of the solution is split into two stages. First we consider a system in a purely transverse weak magnetic field ($B_z = 0, |B_x| < 1$). In this case, the structure of energy

spectrum of a paramagnet is such that the energy levels are arranged in pairs (except the highest solitary energy level for integral S) as a result of splitting due to B_x in the case of double degeneracy in zero magnetic field. For the pair of energy levels under investigation, viz., the ground level and the first excited level, the following formulas hold for the shift that is common for this pair and the energy gap:

$$E_{0,1}^0 = -S^2 - \frac{S}{2(2S-1)} B_x^2 + O(|B_x|^3), \quad S > 1, \\ E_{0,1}^0 = -1 - B_x^2 + O(B_x^4), \quad S = 1, \quad (6)$$

$$\Delta(0) = \Delta|_{B_z=0} = E_1^0 - E_0^0 = \frac{S^2}{2^{2S-3}(2S)!} |B_x|^{2S} \\ + O(|B_x|^{2S+2}). \quad (7)$$

The first of these results follows directly from the conventional perturbation theory, while the second is a finer effect which was obtained by using a special modification of perturbation theory, taking into account the specific form of the perturbation operator $V = -B_x S_x$ (see Ref. 2). We shall also write a more exact expression for the gap:

$$\Delta(0) = \frac{S^2}{2^{2S-3}(2S)!} |B_x|^{2S} \left[1 - \frac{S+1}{2(2S-1)^2} B_x^2 \right]. \quad (8)$$

Such a formula ensures a very high accuracy up to $|B_x| \sim \sqrt{S}$. For example, for $|B_x| = \sqrt{S}/2$, the relative error does not exceed 1%.

The second step involves taking into account the longitudinal component B_z of the magnetic field, which enhances the splitting of energy levels. This is done by using a special version of the perturbation theory for closely spaced energy levels.⁷ If the Hamiltonian of the system is $H = H^0 + V$, we have

$$E_{0,1} = \frac{1}{2} (E_0^0 + E_1^0) \mp \frac{1}{2} \sqrt{(E_0^0 - E_1^0)^2 + 4|V_{01}|^2}, \quad (9)$$

where we have taken into account the fact that the perturbation $V = -B_z S_z$ in our case has strictly zero diagonal matrix elements in the representation of the unperturbed Hamiltonian $H^0 = -S_z^2 - B_x S_x$, and the nondiagonal elements $V_{01} = -B_z \langle 0 | S_z | 1 \rangle$ can also be obtained with the help of the perturbation theory:

$$|\langle 0 | S_z | 1 \rangle|^2 \approx S^2 \left[1 - \frac{1}{(2S-1)^2} B_x^2 \right], \quad S > 1/2. \quad (10)$$

Thus, for $|B_x| \ll 1$, relations (8), (9), and (10) lead to "symmetric repulsion" (Fig. 1) between the ground and first excited energy levels, which is important for further analysis:

$$E_{0,1} = -S^2 - \frac{S}{2(2S-1)} B_x^2 \mp \frac{\Delta}{2}, \quad S > 1, \quad (11)$$

where the terms of higher order of smallness in B_x and B_z have been omitted, and the energy gap in the first approximation is given by

$$\Delta = \sqrt{\Delta(0)^2 + 4S^2 B_z^2} \quad (12)$$

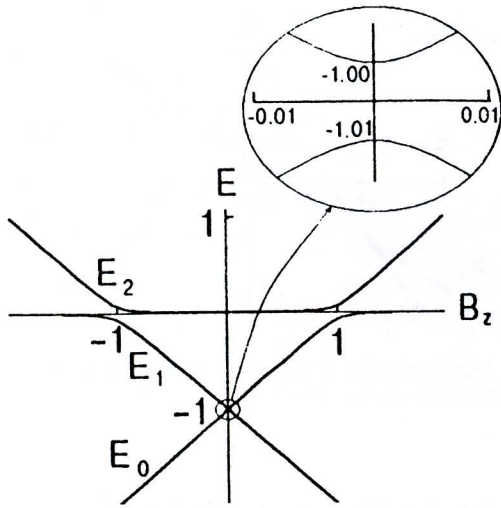


FIG. 1. Structure of energy spectrum of an easy-axis paramagnet for $B_x=0.1$ and $S=1$ (E_j are energy levels).

with $\Delta(0)$ from (7). A more exact equation for Δ can be obtained on the basis of (8) and by replacing the coefficient of $4B_z^2$ in (12) by $S^2 - S^2 B_x^2 / (2S-1)^2$ in accordance with (10). It should be noted that in subsequent calculations we shall use explicitly for the sake of brevity formula (12), although it should be borne in mind that it can be refined by the above method. Going over to the magnetic parameters of the ground state, we obtain from (11) and (12) the magnetization

$$M_z^{(0)}(B_z) = \frac{2S^2 B_z}{\sqrt{\Delta(0)^2 + 4S^2 B_z^2}} \quad (13)$$

and the susceptibility

$$\chi_{zz}^{(0)}(B_z) = \frac{4S^2 \Delta(0)^2}{[\Delta(0)^2 + 4S^2 B_z^2]^{3/2}} \quad (14)$$

(other components are not written here). This leads to the following conclusions. First, for $S=1/2$ these results coincide with exact formulas. Second, the susceptibility component $\chi_{zz}^{(0)}$ has, like the function B_z , the form of the so-called two-dimensional Student distribution for all S . Third, for $B_z \rightarrow 0$, we can write, taking into account corrections,

$$\chi_{zz}^{(0)}(0) = \frac{2^{2S-1} (2S)!}{|B_x|^{2S}} \left[1 + \frac{S-1}{2(2S-1)^2} B_x^2 \right], \quad S > 1/2.$$

A typical profile of this susceptibility component is shown in Fig. 2 for $B_x=0.5$ and $S=1$, where the exact solid curve, the approximate dashed curve obtained by formula (14), and the refined approximate thin curve illustrating the efficiency of the used approximation virtually coincide.

Going over to thermodynamic parameters, we note that the results obtained for the ground state correspond to ultralow temperatures $T \ll \Delta$ at which the contribution of excited states to all thermodynamic parameters is exponentially small. However, the role of these results is not exhausted by what has been said above since for $T \ll 2S-1$ a pair of lower energy levels is separated from the remaining levels, so that the contribution to all the thermodynamic parameters comes

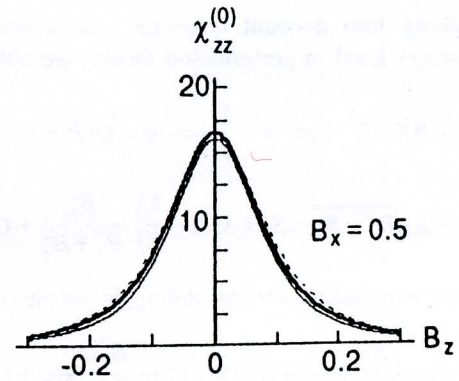


FIG. 2. Magnetic susceptibility $\chi_{zz}^{(0)}$ as a function of B_z for $B_x=0.5$ and $S=1$.

only from the ground and first excited states, while the second and next excited states give exponentially small corrections. Such temperatures will be referred to as low, and the corresponding approximation is called the two-level approximation.

Using formulas (11) for “symmetric repulsion” between the ground and first excited energy levels, we note that the quantities $M_z^{(1)}$, $\chi_{zz}^{(1)}$, and $\chi_{xz}^{(1)}$ in the first excited state differ from the corresponding quantities in the ground state only in sign. Consequently, it follows from formulas (2)–(4) that

$$M_z^T = M_z^{(0)} \tanh \frac{\Delta}{2T},$$

$$\chi_{zz}^T = \chi_{zz}^{(0)} \tanh \frac{\Delta}{2T} + \frac{(M_z^{(0)})^2}{2T \cosh^2(\Delta/2T)}. \quad (15)$$

Similar formulas can also be obtained for M_x^T , χ_{xz}^T , and χ_{xx}^T , the effect of temperature being similar to the effect of B_x . In both cases, sharp spikes of χ_{zz} are smoothed, becoming broader and lower at the center.

In order to have a comprehensive pattern of variation of $\chi_{zz}^{(0)}$ as a function of magnetic field, we must consider this quantity to be a function of the variables of B_x and B_z , i.e., as a surface over the plane (B_x, B_z) . It will be more convenient, however, to consider the cross section $\chi_{zz}^{(0)}(B_z)$ of this surface for certain fixed values of B_x . In other words, we must consider variations of the longitudinal component B_z for a fixed transverse component B_x .

The obtained formulas and corresponding illustrations give a full idea of the behavior of the parameters under investigation in weak magnetic fields. In strong fields, however, the magnetization attains saturation, and susceptibilities decrease rapidly. Nevertheless, we consider the results of calculations in this case also, assuming that the first two terms in the Hamiltonian $H = -B_x S_x - B_z S_z - S_z^2$ are principal and taking into account the magnetic anisotropy term as a correction. It is convenient in this case to choose the coordinate axes so that one of them is directed along the magnetic field. In this case, the Hamiltonian assumes the form $H = -B S_z' - \cos^2 \varphi S_z'^2 + \cos \varphi \sin \varphi (S_x' S_z' + S_z' S_x') - \sin^2 \varphi S_x'^2$, where $\cos \varphi = B_z/B$; $\sin \varphi = B_x/B$; $B = (B_x^2 + B_z^2)^{1/2}$. The first term is principal, while the remaining terms are perturba-

tions. Taking into account quadratic corrections for the ground energy level in perturbation theory, we obtain

$$E_0 = -BS - S^2 \cos^2 \varphi - \frac{S}{2} \sin^2 \varphi + O(B-1)$$

$$= -S\sqrt{B_x^2 + B_z^2} - S^2 + S\left(S - \frac{1}{2}\right) \frac{B_x^2}{B_x^2 + B_z^2} + O(B^{-1}).$$

Using these expressions for calculating the magnetic moment

$$M_z^{(0)} = \frac{SB_z}{(B_x^2 + B_z^2)^{1/2}} + S(2S-1) \frac{B_x^2 B_z}{(B_x^2 + B_z^2)^2} + O\left(\frac{1}{B^2}\right),$$

$$M_x^{(0)} = \frac{SB_x}{(B_x^2 + B_z^2)^{1/2}} - S(2S-1) \frac{B_z^2 B_x}{(B_x^2 + B_z^2)^2} + O\left(\frac{1}{B^2}\right),$$

we obtain the magnetic susceptibility component

$$\chi_{zz}^{(0)} = \frac{2SB_x^2}{(B_x^2 + B_z^2)^{3/2}} + 2S(2S-1) \frac{B_x^2(B_x^2 - 3B_z^2)}{(B_x^2 + B_z^2)^3} + O\left(\frac{1}{B^3}\right),$$

in particular,

$$\chi_{zz}^{(0)}|_{B_z=0} = \frac{2S}{|B_x|} + \frac{2S(2S-1)}{B_x^2} + O\left(\frac{1}{|B_x|^3}\right).$$

The other susceptibility tensor component is given by

$$\chi_{xx}^{(0)} = \frac{2SB_z^2}{(B_x^2 + B_z^2)^{3/2}} - 2S(2S-1) \frac{B_z^2(B_x^2 - 3B_z^2)}{(B_x^2 + B_z^2)^3} + O\left(\frac{1}{B^3}\right),$$

so that

$$\chi_{xx}^{(0)}|_{B_z=0} = O\left(\frac{1}{|B_x|^3}\right).$$

Moreover,

$$\chi_{xx}^{(0)}|_{B_x=0} = \frac{2S}{|B_z|} - \frac{2S(2S-1)}{B_z^2} + O\left(\frac{1}{|B_z|^3}\right).$$

Finally,

$$\chi_{xz}^{(0)} = -\frac{2SB_x B_z}{(B_x^2 + B_z^2)^{3/2}} - 4S(2S-1)B_x B_z \frac{B_x^2 - B_z^2}{(B_x^2 + B_z^2)^3}$$

$$+ O\left(\frac{1}{B^3}\right).$$

Similar results can also be obtained for easy-plane paramagnets in a strong magnetic field (see below), the only difference being the sign of the corrections.

4. THERMODYNAMIC PARAMETERS IN EASY-PLANE PARAMAGNETS

As in the case of easy-axis paramagnets, the results obtained for easy-plane paramagnetic ($\alpha = +1$) are also based on the formula for symmetric splitting of energy levels of the ground state. However, we now have a sequence of points on

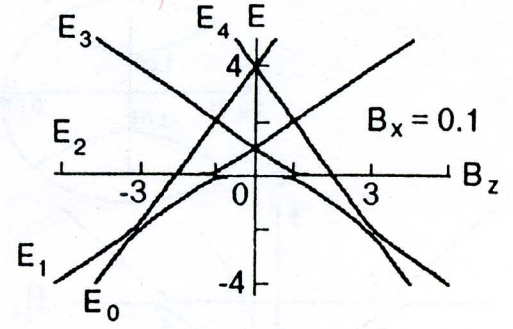


FIG. 3. Typical structure of the energy spectrum of an easy-plane paramagnet in a tilted magnetic field ($S=2$).

the B_z axis, for which junctions in the energy spectrum are formed, for $B_x=0$.

The eigenvalues of the Hamiltonian for the unperturbed problem in a purely longitudinal magnetic field $H_0 = S_z^2 - B_z S_z$ can be classified according to the representation of S_z , which leads to a broken-reticular form of the energy spectrum.⁴ For small values of the transverse magnetic field component $|B_x| \ll 1$, the network of energy levels is slightly deformed so that gaps are formed in regions of broken junctions with double degeneracy (this is illustrated by Fig. 3 for $S=2$ and $|B_x|=0.1$). These gaps are correctly described by perturbation theory for double degeneracy (at the points of junctions) or for closely spaced energy levels (in the neighborhood of these points).

The junction points for the ground and first excited energy levels correspond to values of $B_z = B_m$, for which

$$B_m = 2m - 1, \quad c_m = (S+m)(S-m+1),$$

$$m = -S+1, -S+2, \dots, S-1, S \quad (16)$$

for integral S and

$$B_m = 2m, \quad c_m = (S+1/2)^2 - m^2,$$

$$m = -S+1/2, -S+3/2, \dots, S-3/2, S-1/2 \quad (17)$$

for half-integral S . Using the result obtained in the perturbation theory for double degeneracy or close energy levels, we obtain the following local formulas in the vicinity of each point B_m :

$$E_{0,1} = m^2 - m + 1/2 - (m-1/2)B_z$$

$$\mp \frac{1}{2} \sqrt{c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2} \quad (18)$$

for integral S and

$$E_{0,1} = m^2 - 1/4 - mB_z \mp \frac{1}{2} \sqrt{c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2} \quad (19)$$

for half-integral S .

It is important to emphasize that the root term in (18) and (19) plays a leading role in the subsequent application of the obtained formulas to lower-lying energy levels. In this connection, we shall refer to results (18) and (19) as symmetric splitting. It should also be added that results (18) and

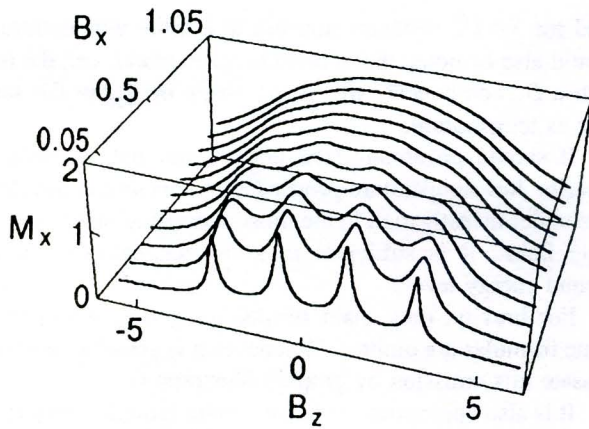


FIG. 4. Magnetization of an easy-plane paramagnet as a function of magnetic field for $S=1$.

(19) are of independent interest in connection with the problem of spin tunneling,^{8,9} where the splitting of energy levels forms the main subject of investigation.

Let us consider the magnetization $M_x^{(0)}$ in the ground state as a function of the longitudinal magnetic field B_z for various values of the transverse component B_x . In accordance with formulas (18) and (19) of symmetric splitting, the required quantity $M_x^{(0)} = -\partial E_0 / \partial B_x$ for the ground energy level for small values of $|B_x| \ll 1$ in the vicinity of values $B_z = B_m$ with junctions between this energy level and the first excited level given by

$$M_x^{(0)}(B_z) = \frac{1}{2} \frac{c_m B_x}{[c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2]^{1/2}}, \quad |B_z - B_m| < 1, \quad (20)$$

where B_m and c_m are defined by (16) and (17).

The number of spikes of $M_x^{(0)}$ on the entire B_z axis is equal to $2S$. Each peak has a typical sharpened shape with a maximum value of $\sqrt{c_m}/2$ at the points $B_z = B_m$ and a width $\sim \sqrt{c_m}|B_x|$ so that the central spikes are slightly higher and wider than the peripheral spikes. For example, in the case of half-integral S , the height of the tallest (central) peak is $(S + 1/2)/2$, while the height of the lowest peak is $\sqrt{S/2}$ (in the case if integral S , we accordingly have $1/2\sqrt{S(S+1)}$ and $\sqrt{S/2}$). Since the separation between the peaks on the B_z axis is equal to 2, these peaks have a tendency (with increasing $|B_x|$) to overlapping and merging into one to form a "crown" which acquires the shape of a bell upon a further increase in $|B_x|$. This is illustrated clearly by a series of curves presented in Fig. 4 for the spin $S=2$.

The second example is the magnetic susceptibility component $\chi_{zz}^{(0)}$ as a function of B_z for various values of B_x . In analogy with $M_x^{(0)}$, this quantity can also be obtained from the formula for symmetric splitting. Being connected with the energy through the formula $\chi_{zz}^{(0)} = -2\partial^2 E_0 / \partial B_z^2$, the susceptibility in the vicinity of broken junctions is given by

$$\chi_{zz}^{(0)}(B_z) = \frac{c_m B_x^2}{[c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2]^{3/2}}, \quad |B_z - B_m| < 1, \quad (21)$$

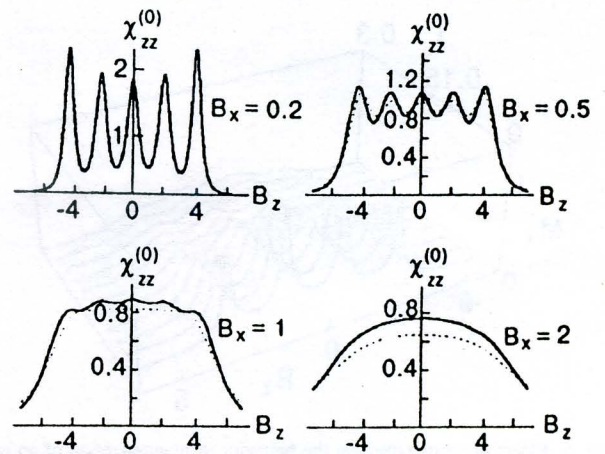


FIG. 5. Susceptibility of an easy-plane paramagnet as a function of the transverse magnetic field component B_x for $S=5/2$ (the dashed curve corresponds to the symmetric splitting approximation).

where the quantities B_m and the coefficients c_m are the same as in formula (20).

In many respects, the properties of magnetic susceptibility are similar to those of magnetization, although in some respects they differ significantly. For example, the spikes are sharper in view of a more rapid decrease with increasing distance from the kink points B_m (following the two-dimensional Student's distribution), and the approximation (21) covers successfully not only the neighborhoods of kinks B_m , but also the regions between these points in which the spikes overlap. In this case, we can use a "global" representation of $\chi_{zz}^{(0)}$ in the form of the summation formula

$$\chi_{zz}^{(0)}(B_z) = \sum_{m=m_1}^{m_2} \frac{c_m B_x^2}{[c_m B_x^2 + (B_z - B_m)^2]^{3/2}},$$

where $m_1 = -S+1$, $m_2 = S$ for integer S and $m_1 = -S + 1/2$, $m_2 = S - 1/2$ for half-integer S . For $\chi_{zz}^{(0)}$, the height $1/(\sqrt{c_m}|B_x|)$ of spikes decreases with increasing $|B_x|$ (the width $\sqrt{c_m}|B_x|$ remaining unchanged), and higher peaks are located at the center and not at the periphery. The corresponding illustrations are presented in Fig. 5. The effect of temperature is the same as in the easy-axis case, and is described by formulas of the type (15) and illustrated by the curves in Figs. 6 and 7.

5. CONCLUSION

The variety of quantities and special cases still allows us to draw some generalizing conclusions concerning the behavior of the systems under investigation on the whole. The main thing is that all peculiarities in the physical parameters mentioned above are observed in the range of small values of transverse magnetic field component, where the energy spectrum experiences a considerable rearrangement. Conversely, for large values of magnetic field, the magnetization attains saturation, while the susceptibility becomes negligibly small.

The type of magnetic anisotropy, i.e., the sign of the constant α , plays a significant role. In the language of susceptibility, we have solitary spikes for $\alpha = -1$ and a system

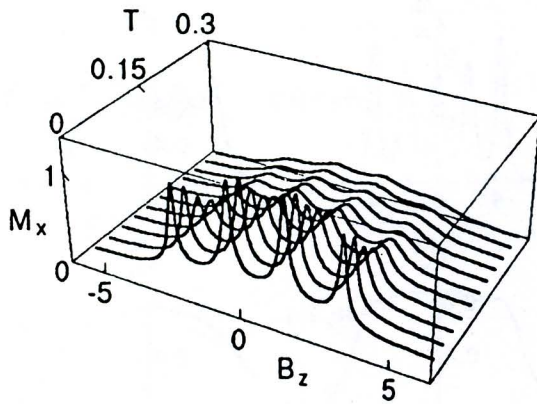


FIG. 6. Effect of temperature on the behavior of magnetization of an easy-plane paramagnet for $B_x=0.1$ and $S=2$.

of $2S$ spikes for $\alpha=+1$. This variety is generalized by universal formulas, e.g., in the form of the two-dimensional Student's distribution for χ_{zz} .

The effect of temperature is reduced to a certain smoothing or blurring of peaks. In the case of purely longitudinal field, point-like singularities of susceptibility in the form of δ -function are replaced by spikes of finite height and width. Similarly, the susceptibility χ_{xx} in a transverse magnetic

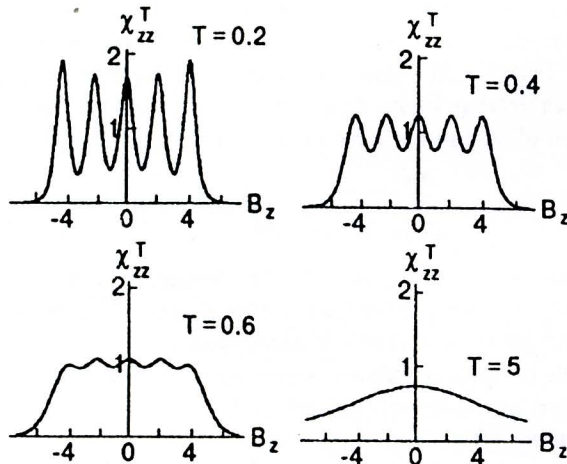


FIG. 7. Effect of temperature on magnetic susceptibility spikes for an easy-plane paramagnet for $B_x=0.2$ and $S=5/2$.

field for $S=1/2$ becomes nonzero at a finite temperature. It should also be noted that a tilted magnetic field, i.e., the field with a B_x component, affects the shape of χ_{zz} in the same way as temperature.

It should be emphasized once again that, in order to describe low-temperature properties of anisotropic paramagnets under investigation in the most interesting range of magnetic fields, it is sufficient to know the behavior of the ground energy level.

For brevity, only main results are given, and cumbersome formulas are omitted. Whenever it is possible, we compensate this omission by graphic illustrations.

It is also appropriate to make certain remarks concerning the method of calculations. The analysis of physical properties of uniaxial paramagnets was based, first, on exact analytic and various approximate calculations, and second, on analytic and numerical computations as well as on graphic illustrations. These approaches are mutually controlled and supplemented. It is the graphical method, which is an analog of a physical experiment, that often stimulates analytic calculations.

The authors express their deep gratitude to V. M. Tsukernik with whom they made their first calculations in the theory of spin systems.

This research is dedicated to A. M. Kosevich who is held as an example of devotion to science by us.

*E-mail: olegzasl@aptn.kharkov.ua;
valdimir.v.ulyanov@univer.kharkov.ua

- ¹O. B. Zaslavskii, V. V. Ulyanov, and V. M. Tsukernik, *Fiz. Nizk. Temp.* **9**, 511 (1983) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **9**, 259 (1983)].
- ²V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii, *Phys. Rep.* **216**, 179 (1992).
- ³V. V. Ulyanov, O. B. Zaslavskii, and Yu. V. Vasilevskaya, *Fiz. Nizk. Temp.* **23**, 110 (1997) [*Low Temp. Phys.* **23**, 82 (1997)].
- ⁴L. D. Filatova and V. M. Tsukernik, *Zh. Éksp. Teor. Fiz.* **56**, 1290 (1969) [*Sov. Phys. JETP* **29**, 694 (1969)].
- ⁵E. V. Rozenfeld, *Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz.* **24**, 60 (1976) [*JETP Lett.* **24**, 50 (1976)].
- ⁶O. V. Zaslavskii and V. V. Ulyanov, *Zh. Éksp. Teor. Fiz.* **87**, 1724 (1984) [*Sov. Phys. JETP* **60**, 991 (1984)]; *Teor. Mat. Fiz.* **71**, 260 (1987)].
- ⁷A. S. Davydov, *Quantum Mechanics*, Pergamon, Oxford, 1976.
- ⁸A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey et al., *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
- ⁹C. P. Bean and J. D. Livingston, *J. Appl. Phys.* **30**, 120S (1959).

Translated by R. S. Wadhwa

ФИЗИКА НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР

ТОМ
9

5 • 1983

УДК 538.22

О. Б. ЗАСЛАВСКИЙ, В. В. УЛЬЯНОВ, В. М. ЦУКЕРНИК

К ТЕОРИИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ СПИНОВЫХ СИСТЕМ С МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

Исследованы энергетический спектр, а также намагниченность и восприимчивость в основном состоянии для спиновой системы, описывающей парамагнитный ион, помещенный в немагнитный кристалл с анизотропией типа «легкая ось», когда магнитное поле перпендикулярно к этой оси. Для некоторых значений спина $S \sim 1$ вычисления проведены точно. Показано, что при любом S собственные значения гамильтониана спиновой системы совпадают с первыми $2S + 1$ уровнями энергии некоторого эффективного одномерного уравнения Шредингера, потенциал которого построен из гиперболических функций. Для $S \gg 1$ эффективный потенциал соответствует существенно ангармоническому осциллятору, превращающемуся при некотором магнитном поле в четверной. Применение различных вариантов теории возмущений, квазиклассики и численных методов позволило получить результаты для всех значений магнитного поля и спина. Установлено, что при $S \geq 3/2$ восприимчивость в основном состоянии как функция поля имеет максимум, что является чисто квантовым эффектом, обусловленным перестройкой энергетического спектра.

При изучении низкотемпературных свойств магнитных систем, описываемых квантовыми спиновыми моделями, часто используется полуклассический подход. Он состоит в том, что на фоне найденной классически равновесной конфигурации рассматриваются квантованные малые колебания намагниченности, т.е. гамильтониан спиновой системы заменяется гамильтонианом системы гармонических квантовых осцилляторов путем перехода к бозевским операторам рождения и уничтожения.

Такая процедура позволяет исследовать широкий круг физических явлений, происходящих в магнитоупорядоченных системах, как для равновесных, так и для неравновесных условий [1]. В частности, если внешнее магнитное поле направлено вдоль легкой оси анизотропии одноосного кристалла, то энергия основного состояния и спектр спиновых волн, найденные полуклассически, точно совпадают с истинными квантовыми при любом значении спина атома [2]. Если же внешнее поле перпендикулярно к оси анизотропии, то значения энергии, вообще говоря, не могут быть найдены точно, а указанное выше полуклассическое рассмотрение приводит к ряду противоречий. Одно из них состоит в том, что в области низких температур при полях, несколько меньших критического, т.е. такого, начиная с которого классический спин становится направленным вдоль поля, поперечная намагниченность в рамках этого рассмотрения оказывается больше максимально допустимой [3]. Данное противоречие не связано непосредственно с тем, что система является магнитоупорядоченной: в отсутствие обменного взаимодействия полуклассический расчет приводит даже к бесконечной намагниченности при поле, равном критическому [4].

Оказывается, что в последнем случае причина возникающих противоречий заключается в том, что в действительности при значениях поля, достаточно близких к критическому, происходит существенная перестройка энергетического спектра, не описываемая в рамках отмеченного выше приближения. Поэтому необходим более корректный учет специфических квантовых эффектов.

Настоящая работа посвящена последовательному квантовомеханическому рассмотрению изолированного спина, находящегося в кристалле с анизотропией типа «легкая ось» в магнитном поле, перпендикулярном к этой оси. Соответствующим физическим объектом является магнито-разбавленный кристалл, например ионы переходной группы в парамагнитных солях. Структура части энергетического спектра такой системы, отвечаю-

щей расщеплению основного энергетического уровня парамагнитного иона кристаллическим полем, хорошо описывается эффективным спинным гамильтонианом [5]. Величина эффективного спина (в дальнейшем для простоты будем говорить просто о спине), определяющая число соответствующих уровней, может быть как малой ($S \sim 1$), так и сравнительно большой ($S \sim 10$).

1. Общие свойства исследуемой спиновой системы. Случай малых спинов

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\mathcal{H} = -\alpha S_z^2 - h S_x, \quad (1)$$

где S_i — оператор i -й проекции спина S ($i = x, y, z$); $\alpha > 0$ — константа магнитной анизотропии; величина h с точностью до множителя, равного произведению магнетона на гиромагнитный фактор, представляет собой магнитное поле (всюду в дальнейшем будем говорить для краткости об h просто как о магнитном поле).

Задача состоит в изучении спектра такого гамильтониана, в частности в нахождении энергии основного состояния, а также намагниченности $\langle S_x \rangle$ и восприимчивости $\chi = 2\alpha d \langle S_x \rangle / dh$ в этом состоянии (множитель 2α введен для удобства).

Напомним вначале результаты классического подхода [6], при котором S_i считаются c -числовыми компонентами вектора длиной S . Для полей, не превосходящих критическое значение $h_0 \equiv 2\alpha S$, существуют два равновесных направления, симметричных относительно оси x , а намагниченность вдоль этой оси линейно возрастает с полем. Начиная со значения $h = h_0$ спин оказывается направленным вдоль оси x , т.е. наступает насыщение. Таким образом, когда поле становится равным критическому, намагниченность при классическом рассмотрении испытывает излом, а восприимчивость имеет скачок. Однако, согласно квантовой механике, $\langle S_x \rangle$ ни при каком конечном магнитном поле для системы с гамильтонианом (1) в случае $\alpha \neq 0$ не может достигнуть величины спина S , поскольку $\langle S_x \rangle$ не имеет определенного значения в стационарном состоянии. Изменение свойств системы происходит достаточно плавно.

Перейдем к последовательному квантовомеханическому рассмотрению. В S_z -представлении волновая функция c_σ стационарного состояния, принадлежащего значению энергии E , удовлетворяет разностному уравнению

$$(E + \alpha \sigma^2) c_\sigma + \frac{h}{2} \left\{ \left[(S + \sigma)(S - \sigma + 1) \right]^{1/2} c_{\sigma-1} + \right. \\ \left. + [(S - \sigma)(S + \sigma + 1)]^{1/2} c_{\sigma+1} \right\} = 0, \quad (2)$$

где значения z -проекции спина обозначены $\sigma = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$.

Из (2) вытекает, что $c_{-\sigma} = \pm c_\sigma$, и, следовательно, распределение вероятностей для величины S_z является четной функцией σ . Поэтому в стационарных состояниях $\langle S_z \rangle = 0$. Из соображений симметрии следует также, что в этих состояниях и $\langle S_y \rangle = 0$. Таким образом, отлично от нуля среднее значение проекции спина только на ось x . Оно может быть найдено дифференцированием энергии по параметру h : $\langle S_x \rangle = -\partial E / \partial h$. Заметим, что система линейных уравнений (2) распадается на две более простые: четные по σ состояния отделяются от нечетных, что значительно упрощает вычисления, в частности позволяет легко найти точные решения для малых спинов. Например, для целого спина и четных состояний имеем $S + 1$ уравнение вместо $2S + 1$.

Значения уровней энергии находятся как корни характеристических уравнений, записанных, например, с использованием конечной цепной дроби. Так, в случае целого спина для нечетных состояний уравнение в соответ-

ствующих стандартных обозначениях для таких дробей [7] может быть представлено в виде

$$E/\alpha + S^2 - \frac{1 \cdot 2S (h/2\alpha)^2}{|E/\alpha + (S-1)^2|} - \dots - \frac{n(2S-n+1)(h/2\alpha)^2}{|E/\alpha + (S-n)^2|} - \dots - \frac{(S-1)(S+2)(h/2\alpha)^2}{|E/\alpha + 1|} = 0. \quad (3)$$

Аналогичные уравнения получаются и в других случаях.

Для значений спина $S = 1/2$; 1; $3/2$ уровни энергии, а также намагниченность и восприимчивость вычисляются точно и имеют простой вид. Например, для спина $S = 3/2$ энергия основного состояния $E_0 = -5\alpha/4 - h/2 - (\alpha^2 - \alpha h + h^2)^{1/2}$. Для спинов же $S = 2$; $5/2$; 3 эти величины получены нами с помощью численного расчета на основе уравнений типа (3).

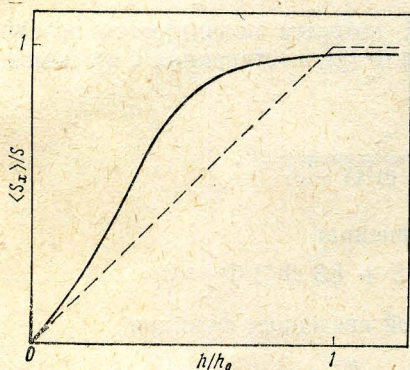


Рис. 1.

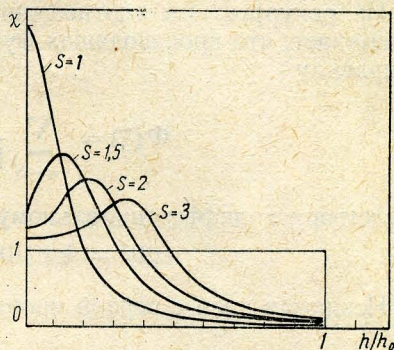


Рис. 2.

На рис. 1 представлен типичный сглаженный «коленообразный» ход намагниченности в сравнении с изломным классическим (выбран случай $S = 3$). Изображенные на рис. 2 характерные зависимости восприимчивости от поля существенно отличаются от классической ступенчатой зависимости.

В области очень малых и предельно сильных полей результаты получаются для произвольного спина с помощью стандартной теории возмущений или непосредственно из уравнений типа (3). Приведем соответствующие выражения для восприимчивости в основном состоянии:

$$\chi = \frac{S}{S-1/2} + \frac{3}{16} \left(\frac{h}{\alpha} \right)^2 \frac{S}{(S-1/2)^3 (S-1)} \quad \text{при } h \ll h_0 / \sqrt{S}, \quad S > 2; \quad (4)$$

$$\chi = \left(\frac{\alpha}{h} \right)^3 S(S-1/2) \quad \text{при } h \gg h_0. \quad (5)$$

Согласно формуле (4), восприимчивость при малых полях возрастает, а в области больших полей, как видно из (5), быстро убывает. Отсюда с учетом результатов для спинов $S = 1$; $3/2$; 2 приходим к следующему заключению о поведении восприимчивости в основном состоянии. Если $S = 1$, то восприимчивость является монотонно убывающей функцией поля; начиная с $S = 3/2$ восприимчивость при малых полях возрастает, проходя затем через максимум, который сохраняется для сколь угодно больших спинов. Поскольку существование этого максимума является чисто квантовым эффектом, всегда имеется область полей, для которой классическое рассмотрение неприменимо. Если спин не является малым, то характерное изменение восприимчивости происходит при полях, близких к критическому (точный критерий будет установлен в разделе 3), в которых и следует ожидать существенного отличия квантовомеханических результатов от классических. В частности, сама точка $h = h_0$ для квантовой системы не

является особой. Результаты теории возмущений не охватывают эту наиболее интересную физически область полей $h \sim h_0$. Характеристические же уравнения типа (3), хотя и позволяют проводить численные расчеты при конкретных значениях спина, являются неудобными для исследования аналитической зависимости интересующих нас величин от поля и спина. Поэтому для исследования системы в случае полей, близких к критическому, в следующем разделе развит весьма наглядный метод, названный нами методом эффективного потенциала.

2. Метод эффективного потенциала

Оказывается, что рассматриваемая задача может быть сведена к решению уравнения типа уравнения Шредингера в некотором эффективном представлении.

Из рекуррентных соотношений (2), которым подчиняются величины c_s , вытекает, что производящая функция $\Phi(\xi)$, построенная с их помощью по правилу

$$\Phi(\xi) = \sum_{s=-S}^S \frac{c_s}{V(S+s)!(S-s)!} e^{s\xi},$$

удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\alpha\Phi'' - hsh\xi\Phi' + (E + hS \operatorname{ch}\xi)\Phi = 0.$$

Исключая член с первой производной введением функции

$$\Psi(\xi) = \Phi(\xi) \exp\left(-\frac{h}{2\alpha} \operatorname{ch}\xi\right),$$

приходим к обычному уравнению Шредингера

$$\alpha\Psi'' + \left[E - \frac{h^2}{4\alpha} \operatorname{sh}^2\xi + h(S + 1/2) \operatorname{ch}\xi\right]\Psi = 0, \quad (6)$$

в котором ξ можно рассматривать как некоторую безразмерную координату, а убывающее на бесконечности решение $\Psi(\xi)$ — как волновую функцию*.

Таким образом, задача о собственных значениях и собственных векторах спинowego гамильтониана $\mathcal{H} = -\alpha S_z^2 - hS_x$ приводит к координатной картине одномерного движения частицы в эффективном потенциальном поле

$$U_s(\xi) = \frac{h^2}{4\alpha} \operatorname{sh}^2\xi - h(S + 1/2) \operatorname{ch}\xi \quad (7)$$

(это справедливо и в общем случае магнитного поля, направленного под произвольным углом к оси анизотропии, но эффективный потенциал будет иметь при этом несколько более сложный вид). Такое описание спиновой системы на основе координатной картины с эффективным потенциалом дает еще один пример применения метода эффективного поля [8].

На основании осцилляционной теоремы для связанных стационарных состояний одномерного уравнения Шредингера и благодаря отсутствию вырождения уровней энергии в этом случае, а также учитывая структуру функции $\Psi(\xi)$, можно прийти к заключению, что интересующие нас значения энергии спиновой системы совпадают с начальными $2S + 1$ уровнями энергии частицы, движущейся в поле с потенциалом (5). Более высокие

* Производящая функция, построенная из экспонент $e^{i\sigma\Phi}$, приводит к уравнению с тригонометрическими функциями и граничными условиями периодичности. Однако при этом исследование основного состояния спиновой системы оказывается более сложным.

энергетические уровни не имеют отношения к исследуемой здесь спиновой системе.

Для получения намагниченности можно, как и выше, воспользоваться дифференцированием по величине магнитного поля.

Найденный эффективный потенциал (7) испытывает любопытную трансформацию при изменении магнитного поля.

Для значений магнитного поля $h > 2\alpha (S + 1/2)$ он имеет вид одинарной ямы (рис. 3, в) а для $h < 2\alpha (S + 1/2)$ превращается в яму с двумя минимумами* (рис. 3, а). Особенно интересно, что потенциал принимает форму ямы с минимумом четвертого порядка (рис. 3, б) при критической величине магнитного поля $h_0 = 2\alpha (S + 1/2)$ (это значение отличается от соответствующего классического добавкой $1/2$ к спину).

Метод эффективного потенциала оказывается особенно полезным, если спин достаточно велик.

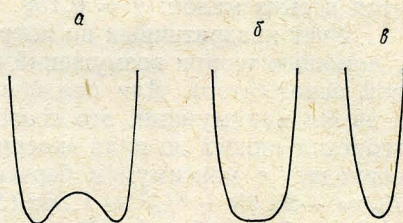


Рис. 3.

3. Случай больших значений спина

Для спинов $S \gg 1$ характерное поведение намагниченности (рис. 1) и восприимчивости (рис. 2, 4) обусловлено существенной перестройкой энергетического спектра в области полей $|h - h_0| \sim h_0 S^{-2/3}$ при переходе эффективного потенциала от одной формы к другой. В таких полях поведение потенциала (7) хорошо аппроксимируется для основного и низковозбужденных состояний степенным приближением, которое заключается в разложении гиперболических функций в ряд по степеням ξ вблизи $\xi = 0$.

Совершая масштабное преобразование координаты $\xi = (S + 1/2)^{-1/3} q$ и ограничиваясь в коэффициентах разложения главными членами по $h - h_0$, получаем гамильтониан, соответствующий уравнению (6), в виде

$$\mathcal{H}_s = -h(S + 1/2) + \alpha(S + 1/2)^{2/3} [p^2 + q^4/4 + \gamma q^2 + O(S^{-2/3})], \quad (8)$$

где $p = -i\partial/\partial q$, а также введен параметр $\gamma \equiv (S + 1/2)^{2/3} (h - h_0)/h_0$, принимающий в указанной выше физической области наиболее интересный области значения $|\gamma| \sim 1$. Для окрестности критического магнитного поля ($|\gamma| < 1$) профиль потенциала (7) определяется четвер-

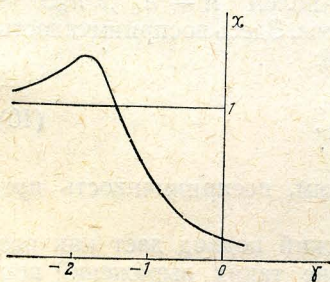


Рис. 4.

тым членом, а квадратичное слагаемое играет роль поправки.

В случае критического магнитного поля, когда $\gamma = 0$, получаем чисто четверной осциллятор. Свойства такого осциллятора изучены во многих работах (см., например, [9, 10]). Расчет дает следующие результаты. Энергия основного состояния $E_0 = -2\alpha (S + 1/2)^2 + 0,668\alpha (S + 1/2)^{2/3}$, где первое слагаемое соответствует минимуму потенциала — классическому результату, а второе — квантовой добавке, обусловленной вкладом энергии нулевых колебаний**. Намагниченность равна $\langle S_x \rangle = S + 1/2 - 0,287 (S + 1/2)^{1/3}$. Как и следовало ожидать, она не превосходит мак-

* Обратим внимание на соответствие отмеченной во введении классической картине, согласно которой при $h > 2\alpha S$ имеется одно положение равновесия, а при $h < 2\alpha S$ — два.

** Здесь и в дальнейшем в соответствии с разложением (8) отбрасываем члены $\sim S^{-2/3}$ по отношению к последним удерживаемым, а все численные значения приводим с округлением до трех значащих цифр.

симально допустимое значение S благодаря отрицательному члену, по сравнению с которым добавка $1/2$ мала. Обратим внимание на то, что зависимость энергии основного состояния и соответствующей намагниченности от величины спина не является аналитической. Восприимчивость оказывается весьма малой: $\chi = 0,138$.

Учет квадратичных по координате поправок в формуле (6) проводится с помощью теории возмущений (невозмущенной системой является четверной осциллятор). Для полей с $\gamma < 0$, когда потенциал имеет вид ямы с двумя минимумами, это позволяет изучить поведение магнитных характеристик вплоть до поля «касания» ($\gamma = -0,881$), когда основной уровень совпадает с максимумом барьера, разделяющего ямы. При этом энергия $E_0 = -2\alpha (S + 1/2)^2 + 1,76\alpha (S + 1/2)^{4/3}$, намагниченность $\langle S_x \rangle = S + 1/2 - 0,518 (S + 1/2)^{1/3}$, восприимчивость $\chi = 0,469$.

Однако для меньших значений магнитного поля ($\gamma < -1$) вблизи ожидаемого максимума восприимчивости нулевые колебания существенно отличаются от характерных для четверного осциллятора. В области достаточно малых полей $h_0 - h \gg h_0 S^{-2/3}$ ($|\gamma| \gg 1$) справедлив другой вариант теории возмущений. При этом невозмущенной системой является гармонический осциллятор, отвечающий локальным колебаниям в отдельной яме. В соответствующей восприимчивости

$$\chi \approx 1 + \frac{\alpha h_0^2}{(h_0^2 - h^2)^{3/2}} \quad (9)$$

единица есть классический результат, а второй член обусловлен нулевыми колебаниями. В качестве возмущения можно учесть влияние ангармонизмов и туннелирования. Тем не менее оказывается, что такой подход в районе максимума восприимчивости ($-3 < \gamma < -1$) является слишком грубым приближением.

Заметим, кстати, что к слабо ангармоническим колебаниям приводит также рассмотрение для больших магнитных полей $h - h_0 \gg h_0 S^{-2/3}$ ($\gamma \gg 1$), когда потенциал имеет вид одинарной ямы. Здесь восприимчивость в основном состоянии является малой величиной:

$$\chi \approx \frac{h_0^3}{4(2S + 1)[h(h - h_0)]^{3/2}}, \quad (10)$$

тогда как, согласно классическим представлениям, восприимчивость при $h > h_0$ строго равна нулю.

Упомянутый выше во введении полуклассический подход дает как раз результаты типа (9), (10). Формальное применение таких выражений при $h \rightarrow h_0$ приводит к расхождением, что непосредственно связано с отмечавшимися во введении противоречиями. В действительности, однако, эти формулы справедливы лишь вдали от критического поля. Как можно показать, при близких к критическому полях опущенные в полуклассическом подходе члены разложения гамильтониана по бозе-операторам являются главными.

В околоскритической области колебания становятся существенно нелинейными в связи с перестройкой энергетического спектра: если для полей с $\gamma \gg 1$ расположение низколежащих уровней является приближенно эквидистантным, то для окрестности критического поля $|\gamma| \sim 1$ оно соответствует четверному осциллятору, а в области $\gamma \lesssim -1$ первый возбужденный уровень сближается с основным в соответствии с туннельным расщеплением в достаточно глубокой яме.

С целью перекрытия «островка» промежуточных значений магнитного поля ($-3 < \gamma < -1$), где расположен максимум восприимчивости, применено квазиклассическое приближение с учетом особенности эффективного потенциала в виде барьера между ямами (рис. 3, а) [11]. С его помощью удается получить все интересующие нас детали поведения восприимчивости

в интервале магнитных полей с $-3 < \gamma < -1$, включая окрестность ее максимума, где относительная погрешность даже для восприимчивости не превышает 2 %.

То, что с помощью квазиклассических методов и учета особенности потенциала удастся передать тонкие детали структуры энергетического спектра, еще раз свидетельствует о широких возможностях квазиклассического метода даже при исследовании основного состояния системы [8].

Для больших магнитных полей ($\gamma > -1$), когда основной уровень энергии расположен выше максимума потенциала, высокую точность, как отмечено выше, обеспечивает теория возмущений с базисом четверного осциллятора. Результаты квазиклассики и теории возмущений хорошо сшиваются.

Кроме того, мы провели расчет, используя вариационный метод. В соответствии с «двугорбым» при $\gamma < 0$ видом волновой функции основного состояния выбирались пробные функции типа «двойного гауссиана» $\Psi(\xi) = \exp[-(\xi - a)^2/b^2] + \exp[-(\xi + a)^2/b^2]$, позволяющие получить сравнительно простое и удобное для варьирования выражение для энергии. При этом удалось достаточно точно вычислить энергию и намагниченность (с относительной погрешностью порядка нескольких процентов). Хорошо воспроизводится и общий ход восприимчивости, но тонкие детали в окрестности максимума восприимчивости передаются огрубленно (например, величина максимума находится с относительной погрешностью 15 %).

Для проверки всех применяемых аналитических аппроксимаций были использованы численные методы. Оказывается, восприимчивость достигает максимума $\chi_{\max} = 1,31$ при значении поля, соответствующем $\gamma = -1,87$. Энергетическая щель между основным и первым возбужденным состояниями при этом равна $\Delta E = 0,141\alpha (S + 1/2)^2 / 3$.

Для оценки эффективности степенного приближения, отвечающего случаю $S \gg 1$, результаты для восприимчивости, представленные на рис. 4, сравнивались с полученными для $S = 10$ численно. В области максимума восприимчивости относительная погрешность для нее не превышает 10 %. Учет первых отбрасываемых членов в выражении (8) уменьшает относительную погрешность степенного приближения примерно на порядок даже в случае $S \sim 1$.

Подчеркнем, что результаты, относящиеся к степенному приближению (8) для эффективного потенциала, представляют самостоятельный интерес, поскольку квантовая задача о движении частицы в подобных потенциальных полях часто встречается в различных разделах квантовой теории.

Заметим, что поведение намагниченности в основном состоянии при изменении поля существенно зависит от типа анизотропии, т.е. от знака α . Так, если в рассмотренной нами системе с $\alpha > 0$ намагниченность изменяется непрерывно, то при $\alpha < 0$ в поле, перпендикулярном к «легкой плоскости» и меньшем соответствующего критического значения, — скачкообразно [12, 13]. Это различие квантовых свойств приводит к неодинаковой роли низкотемпературных добавок: в первом случае они экспоненциально малы, тогда как во втором обуславливают характерное размытие скачков намагниченности.

Для наблюдения найденной зависимости восприимчивости от магнитного поля температура системы должна быть меньше, чем ΔE . По экспериментальным данным для константы анизотропии парамагнитных ионов [9], это будет соответствовать температурам ~ 1 К. Характерные значения напряженности критического магнитного поля $\sim 10^5$ э.

Заключение

В результате последовательного квантовомеханического решения задачи выяснилось, что в окрестности критического магнитного поля происходит достаточно плавное «коленообразное» изменение намагниченности

для основного состояния при всех значениях спина, кроме $S = 1/2$ и $S = 1$ (см. рис. 1, на котором штриховая линия отвечает классическому излому ходу). Оказалось также, что ступенчатый характер классической картины для восприимчивости заменяется сглаженным ходом, однако сглаживание сопровождается появлением максимума (рис. 2). При этом максимум сохраняется в пределе сколь угодно больших значений спина (рис. 4) и появляется из-за перестройки энергетического спектра, которая в случае $S \gg 1$ происходит в околоритической области магнитных полей с относительно небольшими размерами $|h - h_0|/h_0 \sim S^{-2/3}$.

Исследование всех этих тонких эффектов потребовало развития специальных методов. Наиболее наглядным и действенным, с нашей точки зрения, явился переход к эффективному координатному описанию с помощью некоторого класса полей, построенных из гиперболических функций. Этот результат может представлять самостоятельный интерес.

Для больших значений спина ($S \gg 1$) в указанной наиболее важной околоритической области магнитных полей эффективный потенциал аппроксимируется степенной функцией координат. Задача сводится к исследованию существенно ангармонического осциллятора, в котором главную роль играет член четвертого порядка по координатам. Еще раз подчеркнем, что при критическом значении магнитного поля h_0 имеем чисто четверной осциллятор. Для полей $|h - h_0| \ll h_0 S^{-2/3}$ квадратичный член служит поправочным, и применима теория возмущений. В области же полей $h_0 - h \leq h_0 S^{-2/3}$ движение носит характер локальных колебаний в отдельной яме (рис. 3, а), возмущаемых туннелированием. Здесь весьма высокую точность обеспечивает квазиклассическое приближение с учетом особенности потенциала в виде барьера, разделяющего ямы, что еще раз подтверждает эффективность квазиклассических методов даже в случае основного состояния и потенциала с особенностями. Обе аппроксимации достаточно хорошо сшиваются и передают все тонкости поведения намагниченности и восприимчивости.

Для более детального исследования окрестности максимума восприимчивости и контроля точности применяемых аналитических методов проведено численное решение эффективного стационарного уравнения Шредингера.

Полученные в работе результаты описывают поведение рассмотренной спиновой системы в области достаточно низких температур практически для всех значений магнитного поля и спина.

О. Б. ZASLAVSKII, V. V. UL'YANOV, and V. M. TSUKERNIK

ON THE THEORY OF LOW TEMPERATURE SUSCEPTIBILITY OF SPIN SYSTEMS WITH MAGNETIC ANISOTROPY

¶ This is an investigation of the energy spectrum, magnetization and susceptibility of the ground state of a spin system describing the paramagnetic ion implanted in a non-magnetic crystal with the «easy axis» anisotropy for the case of the magnetic field perpendicular to the axis. For some of the spin values $S \sim 1$ the calculations were carried out precisely. It is shown that for any S , the spin system Hamiltonian eigenvalues coincide with the first $2S + 1$ energy levels a certain effective one-dimensional Schrödinger equation whose potential is constructed from hyperbolic functions. For $S \gg 1$ the effective potential corresponds to an essentially anharmonic oscillator which converts at a certain magnetic field into quartic oscillator. By using various variants of the perturbation theory, quasi-classical and numerical methods, results were obtained for all magnetic field and spin values. For $S \gg 3/2$ the ground state susceptibility as a function of the field was found to have a maximum which is a purely quantum effect due to rearrangement of the energy spectrum.

LIST OF SYMBOLS

\mathcal{H} , Hamiltonian; S , spin; α , magnetic anisotropy constant; h , quantity proportional to the magnetic field; E , energy level; χ , susceptibility.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., Пелетминский С. В. Спинные волны.— М.: Наука, 1967.— 368 с.
2. Маттис Д. Теория магнетизма.— пер. с англ. / Под ред. И. М. Лифшица и М. И. Каганова.— М.: Наука, 1967.— 407 с.
3. Туров Е. А. Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов.— М.: Изд-во АН СССР, 1963.— 224 с.
4. Филатова Л. Д., Цукерник В. М. Намагниченность ферродиелектрика вдоль оси трудного намагничивания.— ЖЭТФ, 1967, 53, вып. 6, с. 2203—2209.
5. Абрагам А., Блани Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. Т. 1. — Пер. с англ. / Под ред. С. А. Альшулера и Г. В. Скроцкого.— М.: Мир, 1972.— 647 с.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред.— М.: Гостехиздат, 1957.— 532 с.
7. Математическая энциклопедия. Т. 3.— М.: Сов. энциклопедия, 1982.— 592 с.
8. Ульянов В. В. Интегральные методы в квантовой механике.— Харьков: Вища школа. 1982.— 160 с.
9. Chan S. I., Stelman D., Thompson L. E. Quartic oscillator as a basis for energy level calculations of some anharmonic oscillator.— J. Chem. Phys., 1964, 41, N 9, p. 2828—2835.
10. Chan S. I., Stelman D. Some energy levels and matrix elements of the quartic oscillator.— J. Mol. Spect., 1963, 10, N 4, p. 278—299.
11. Ульянов В. В. О квазиклассическом движении в особых случаях.— УФЖ, 1973, 18, № 11, с. 1848—1859.
12. Филатова Л. Д., Цукерник В. М. Термодинамические и высокочастотные свойства парамагнетика с отрицательной константой анизотропии при низких температурах.— ЖЭТФ, 1969, 56, вып. 4, с. 1290—1296.
13. Розенфельд Е. В. О квантовых скачках намагниченности в магнетиках с анизотропией типа «легкая плоскость».— Письма в ЖЭТФ, 1976, 24, вып. 2, с. 60—64.

Харьковский государственный
университет им. А. М. Горького

Получено
30.09.82

Физико-технический институт
низких температур АН УССР,
г. Харьков

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК)

11

МОСКВА • 1984

НОВЫЕ КЛАССЫ ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА И ОПИСАНИЕ СПИНОВЫХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОЛЕЙ

О. Б. Заславский, В. В. Ульянов

Обнаружены новые классы точных решений стационарного одномерного уравнения Шредингера для полей типа потенциальной ямы и периодических потенциалов. Эти решения относятся к $2S+1$ низшим энергетическим уровням (S — целое или полуцелое число, входящее в потенциалы), которые отвечают собственным значениям спинового гамильтониана, описывающего анизотропный парамагнетик со спином S во внешнем магнитном поле. Найденные потенциалы являются одно- и двухпараметрическими (для фиксированного S), а их форма и структура энергетического спектра существенно изменяются в зависимости от значений параметров. В частности, получаются симметричная и несимметричная ямы с двумя минимумами и яма с четверным минимумом. Простые точные аналитические выражения для волновых функций и значений энергии, например, в однопараметрическом случае, имеются при $S=0, 1/2, 1, 3/2, 2$. Соответствие между координатной и спиновой системами связано с тем, что координатный гамильтониан может быть представлен в виде комбинации линейных дифференциальных операторов, удовлетворяющих соотношениям коммутации для компонент спина.

В теории магнетизма широко используется описание динамического взаимодействия, затрагивающего только координатные степени свободы, на языке спинных переменных, что является, как правило, приближенным и связано с теми или иными физическими допущениями: возможностью усреднения по орбитальным переменным, применимостью теории возмущений и т. д. (характерный пример — гамильтониан Гейзенберга [1–3]). Оказывается, однако, что есть случаи спин-координатного соответствия, имеющего строгий смысл, когда координатный гамильтониан можно непосредственно выразить через дифференциальные операторы, фактически играющие роль операторов эффективного спина (подробнее см. § 4).

В работе [4] показано, что энергетический спектр спинового гамильтониана, описывающего парамагнетик с анизотропией типа «легкая ось» во внешнем магнитном поле, перпендикулярном этой оси, совпадает с первыми $2S+1$ уровнями энергии частицы, движущейся в потенциальном поле определенного вида (S — величина спина). В этом случае мы имеем дело с обратным переходом — от спинового, дискретного пространства к координатному, что представляет собой весьма необычный пример метода эффективного поля [5] (оказавшегося здесь полезным при изучении низкотемпературных свойств парамагнетика при $S \gg 1$). Для координатной системы это означает нахождение нового класса точных решений уравнения Шредингера. При этом особый интерес представляют собой случаи, когда спин не очень велик, так что характеристические уравнения в спиновом пространстве допускают простые явные решения. Подобное спин-координатное соответствие существует также и для анизотропного парамагнетика в произвольно направленном магнитном поле.

Перейдем к конкретному рассмотрению точных решений, которые, как мы увидим, естественно группируются в три класса.

§ 1. Класс точных решений для симметричных потенциалов

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера для частицы, движущейся в одномерном потенциальном поле,

$$\Psi'' + [\varepsilon - U(\xi)] \Psi = 0 \quad (1)$$

(для простоты энергетические величины и координата ξ выбраны безразмерными), где потенциал построен из гиперболических функций и содержит два параметра (B и S):

$$U(\xi) = \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2 \xi - B \left(S + \frac{1}{2} \right) \operatorname{ch} \xi. \quad (2)$$

В общем случае нахождение точных решений такого уравнения невозможно. Пусть, однако, $S \geq 0$ — целое или полуцелое, а $B > 0$. Тогда непосредственной проверкой можно убедиться, что существуют решения уравнения (1) вида

$$\Psi(\xi) = \exp \left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi \right) \sum_{\sigma=-S}^S \frac{c_\sigma}{((S-\sigma)!(S+\sigma)!)^{1/2}} \exp(\sigma \xi), \quad (3)$$

где коэффициенты c_σ удовлетворяют системе линейных уравнений конечного порядка

$$(\varepsilon + \sigma^2) c_\sigma + \frac{B}{2} [((S-\sigma)(S+\sigma+1))^{1/2} c_{\sigma+1} + ((S+\sigma)(S-\sigma+1))^{1/2} c_{\sigma-1}] = 0, \quad (4)$$

$$c_{S+1} = c_{-S-1} = 0; \quad \sigma = -S, -S+1, \dots, S,$$

а значения уровней энергии находятся из соответствующего характеристического уравнения. На основании осцилляционной теоремы можно заключить, что такие решения отвечают только первым $2S+1$ уровням энергии для уравнения Шредингера (1).

Можно видеть, что решение системы (4) эквивалентно нахождению собственных значений безразмерного спинового гамильтониана $H = -S_z^2 - BS_x$, где S_x, S_z — операторы соответствующих проекций спина S ; c_σ представляет собой волновую функцию в S_z -представлении, B пропорционально магнитному полю¹⁾. (Возникающие при этом вопросы алгебраического характера обсуждаются в § 4.)

Для каждого фиксированного целого или полуцелого S выражение (2) определяет семейство потенциальных полей, зависящих от одного параметра B , изменение которого приводит к весьма существенной деформации профиля потенциала. Если $B > B_0 = 2S+1$, потенциал имеет вид одианной ямы с простым минимумом, при $B < B_0$ он становится ямой с двумя минимумами, а при $B = B_0$ возникает яма с минимумом четвертого порядка.

В рассматриваемом классе задач точные решения, как отмечено выше, находятся для ограниченного числа низковозбужденных уровней энергии. Если S не слишком велико, волновые функции и значения энергии имеют простые явные выражения, что представляет особый интерес, поскольку обычно именно низковозбужденные состояния являются объектом чисто квантового исследования (в то время как для высоковозбужденных состояний хорошие результаты дает квазиклассический подход).

Система линейных уравнений (4) распадается на две более простые: четные по σ состояния отделяются от нечетных, что значительно упрощает вычисления. Например, для целого спина и четных состояний имеем $S+1$ уравнение вместо $2S+1$. Рассмотрим примеры получающихся простых явных аналитических выражений для уровней энергии и волновых функций стационарных состояний.

Если $S=0$ (для спиновой системы данный случай является тривиальным, однако в координатной картине потенциал претерпевает изменения формы, типичные и для других S), то энергия основного состояния $\varepsilon_0 = 0$

¹⁾ Укажем, что при переходе от спиновой системы к координатной прием введения производящей функции вида (3) аналогичен, например, преобразованию [6], применявшемуся при исследовании модели Дикке.

не зависит от B , а

$$\Psi_0(\xi) = A_0 \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right).$$

В случае $S=1/2$ соответствующие величины равны

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= -\frac{1}{4} - \frac{B}{2}; & \Psi_0(\xi) &= A_0 \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \operatorname{ch} \frac{\xi}{2}; \\ \varepsilon_1 &= -\frac{1}{4} + \frac{B}{2}; & \Psi_1(\xi) &= A_1 \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \operatorname{sh} \frac{\xi}{2}. \end{aligned} \quad (5)$$

При $S=1$, объединяя состояния с одинаковой четностью, имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,2} &= -\frac{1}{2} \mp (B^2 + \frac{1}{4})^{1/2}; & \Psi_{0,2}(\xi) &= A_{0,2} \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \left(1 - \frac{\varepsilon_{0,2}}{B} \operatorname{ch} \xi\right); \\ \varepsilon_1 &= -1; & \Psi_1(\xi) &= A_1 \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \operatorname{sh} \xi \end{aligned} \quad (6)$$

(здесь и в дальнейшем верхний знак относится к левому индексу).

Случай $S=3/2$ представляет особый интерес, поскольку ему отвечает максимальное число точных решений для энергии, имеющих простой явный вид и передающих достаточно полно характерные особенности энергетического спектра. При этом

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,2} &= -\frac{5}{4} - \frac{B}{2} \mp (B^2 - B + 1)^{1/2}; & \Psi_{0,2}(\xi) &= A_{0,2} \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \cdot \\ & & & \cdot \left[\operatorname{ch} \frac{3\xi}{2} - \frac{2}{B} \left(\varepsilon_{0,2} + \frac{9}{4}\right) \operatorname{ch} \frac{\xi}{2} \right]; \\ \varepsilon_{1,3} &= -\frac{5}{4} + \frac{B}{2} \mp (B^2 + B + 1)^{1/2}; & \Psi_{1,3}(\xi) &= A_{1,3} \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \cdot \\ & & & \cdot \left[\operatorname{sh} \frac{3\xi}{2} - \frac{2}{B} \left(\varepsilon_{1,3} + \frac{9}{4}\right) \operatorname{sh} \frac{\xi}{2} \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

Если $S=2$, простые результаты удается получить для нечетных стационарных состояний, так как характеристическое уравнение в этом случае является квадратным (а для четных — кубическим):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,3} &= -\frac{5}{2} \mp \left(B^2 + \frac{9}{4}\right)^{1/2}; & \Psi_{1,3}(\xi) &= \\ & & & = A_{1,3} \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \left[\operatorname{sh} 2\xi - \frac{2}{B} (\varepsilon_{1,3} + 4) \operatorname{sh} \xi \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Отметим некоторые общие свойства энергетического спектра, характерные не только для целых или полуцелых S . Упомянутая выше деформация профиля потенциала сопровождается существенным изменением структуры спектра. Так, при $B \gg B_0$ спектр представляет собой веер уровней, в первом приближении линейно зависящих от B , а для $B=B_0$ соответствует осциллятору с сильной нелинейностью (четверного типа). Любопытно, что, хотя для потенциала вида $U(\xi) = \beta \xi^4$ точные решения, как известно, отсутствуют, их удалось найти в случае более сложной функции $B_0^2 \operatorname{sh}^4(\xi/2)$ (для низколежащих состояний).

При малых B спектр состоит из совокупности попарно сближающихся уровней спинowego (для S целых или полуцелых) происхождения, отвечающих двум симметрично расположенным уединенным (в пределе $B=0$) потенциальным ямам Морса, а также «надспиновых» уровней, которые образуют квазинепрерывную часть спектра и сгущаются к нулевому значению.

Указанные изменения формы потенциала и характера энергетического спектра приводят для соответствующей спиновой системы к такому физическому следствию, как, например, существование максимума низкотемпературной магнитной восприимчивости как функции магнитного поля [4].

§ 2. Класс несимметричных потенциалов

Результаты, полученные в § 1, обобщаются на случай потенциальных полей вида

$$U(\xi) = \frac{B^2}{4} \left(\operatorname{sh} \xi - \frac{C}{B} \right)^2 - B \left(S + \frac{1}{2} \right) \operatorname{ch} \xi, \quad (9)$$

которые, в отличие от (2), являются несимметричными и содержат при фиксированном S два изменяющихся параметра: $B > 0$ и $C > 0$. При этом волновые функции первых $2S+1$ уровней имеют вид, отличающийся от (3) множителем $\exp(C\xi/2)$, а величины c_σ удовлетворяют уравнению, аналогичному (4), с той лишь разницей, что коэффициент при c_σ содержит дополнительное слагаемое σC .

В данном случае профиль потенциала существенно различен в зависимости от того, лежит ли соответствующая системе точка на плоскости параметров B, C внутри, снаружи или на астроиде $B^{2/3} + C^{2/3} = B_0^{2/3}$. В первом случае потенциал представляет собой яму с двумя минимумами, во втором — с одним, в третьем случае максимум и ближайший минимум сливаются, образуя точку перегиба с горизонтальной касательной. Точка $C=0, B=B_0$ на астроиде соответствует критическому полю для симметричного случая.

Интересно, что отмеченная выше деформация профиля потенциала является одним из характерных примеров преобразований, изучаемых теорией катастроф, а именно — катастрофой типа сборки, простейшая реализация которой встречается в так называемой машине Зимана [7].

Потенциалу (9) отвечает безразмерный спиновый гамильтониан $H = -S_z^2 - BS_x - CS_z$, описывающий анизотропный легкоосный парамагнетик, где B и C пропорциональны соответственно поперечной и продольной компонентам магнитного поля. Указанное уравнение астроиды является квантовым обобщением уравнения, выделяющего область метастабильных состояний для такого парамагнетика в классическом случае [8].

В отличие от (4), теперь в характеристическом уравнении четные состояния не отделяются от нечетных, так что порядок уравнения равен $2S+1$. Приведем простые точные решения для $S=0$ (при этом потенциалы (6) и (2) имеют вид, связанный с суперсимметричной квантовой механикой — см. [9]) и $S=1/2$.

В первом случае

$$\varepsilon_0 = 0; \quad \Psi_0(\xi) = A_0 \exp \left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi + \frac{C}{2} \xi \right),$$

а во втором

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0;1} &= -\frac{1}{4} \mp \frac{(B^2 + C^2)^{1/2}}{2}; \quad \Psi_{0;1}(\xi) = \\ &= A_{0;1} \exp \left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi + \frac{C}{2} \xi \right) \left(e^{\xi/2} - \frac{C \mp (B^2 + C^2)^{1/2}}{B} e^{-\xi/2} \right). \end{aligned}$$

Заметим, что к рассматриваемым решениям при $C=0$ из специальных функций наиболее близки кулоновские сфероидальные [10]. Случай же $C \neq 0$ дает одно из обобщений этого класса спецфункций.

Энергетический спектр обладает рядом весьма интересных свойств, отсутствующих у симметричного потенциала (2), которые наиболее ярко проявляются в пределе $B=0$. Обратим, например, внимание на своеобразный характер поведения уровней $\varepsilon_n(C)$ в зависимости от C . В обла-

сти $C \leq 2S$, когда потенциал имеет вид двух уединенных ям Морса различной глубины, при некоторых целых значениях C уровни энергии оказываются двукратно вырожденными. Это приводит к излому поведению всех уровней $\varepsilon_n(C)$, за исключением основного, энергия которого монотонно убывает с ростом C : $\varepsilon_0 = -S^2 - CS$. Поскольку изломы $\varepsilon_n(C)$ относятся к возбужденным состояниям, скачков намагниченности при низких температурах не происходит (в то время как в случае спинового гамильтониана типа «легкая плоскость» скачки существуют [11], так как изломным оказывается поведение основного уровня).

При $B \neq 0$ вырождение снимается, и соответствующие уровни «отталкиваются» друг от друга.

Для поведения спектра в сильных «полях» характерной является линейная зависимость уровней энергии от «напряженности» $(B^2 + C^2)^{1/2}$.

Подчеркнем теперь следующие различия между рассмотренными выше классами потенциальных полей и стандартными квантовомеханическими точно решаемыми моделями [12, 13]. Во-первых, последние являются фактически однопараметрическими. Их можно записать в виде $U(x) = U_0 f(x/a)$. При изменении параметра U_0 меняется «интенсивность», но не форма потенциала. К числу таких моделей относятся, например, потенциалы Эккарта и Морса

$$-U_0/\cosh^2 x/a, U_0[\exp(-2x/a) - 2\exp(-x/a)].$$

Степенные же модели (гармонический осциллятор, четверной осциллятор, линейный потенциал) по существу вообще не содержат параметра, так как в безразмерных переменных уравнение Шредингера имеет вид $\Psi'' + (\varepsilon - \xi^m)\Psi = 0$.

В то же время модели спинового происхождения, рассматриваемые в данной работе, гораздо богаче возможностями. Так, форма потенциала может существенно изменяться даже в однопараметрическом случае, т. е. когда $C = 0$. Модели же с $C \neq 0$, приводящие к дупараметрическому (при заданном S) потенциалу, по-видимому, вообще не имеют аналогов среди простых моделей потенциальных полей. Заметим, что в работе [14] найдены точные решения для несимметричных двойных ям, однако потенциал при этом выражается сложным образом через вырожденную гипергеометрическую функцию, хотя спектр при этом аналогичен уровням энергии гармонического осциллятора.

Во-вторых, в рассматриваемом нами случае спектр целиком является дискретным, а потенциалы не имеют сингулярностей. В этом отношении обнаруженные симметричные потенциалы можно было бы сопоставить из стандартных точно решаемых моделей отчасти только с одной — гармоническим осциллятором. Однако, как уже подчеркивалось, профиль последнего фиксирован, структура энергетического спектра однообразна.

§ 3. Периодические потенциалы с точными решениями

До сих пор мы рассматривали уравнение Шредингера для потенциалов типа ямы; дискретный спектр при этом получался как следствие убывания волновой функции на бесконечности. Оказывается, что существует также класс периодических потенциалов, допускающих точные решения и имеющий непосредственную связь со спиновой системой. Соответствующее уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{d\varphi^2} + \left[\kappa - \frac{B^2}{4} \sin \varphi - B \left(S + \frac{1}{2} \right) \cos \varphi \right] \Psi = 0. \quad (10)$$

Оно может быть получено из (1), (2) формальной заменой $\xi \rightarrow i\varphi$. Волновые функции для значений энергии, принадлежащих спектру соответ-

вующей спиновой системы, имеют вид

$$\Psi(\varphi) = \exp\left(-\frac{B}{2} \cos \varphi\right) \sum_{\sigma=-S}^S \frac{c_{\sigma}}{((S-\sigma)!(S+\sigma)!)^{1/2}} \exp(i\sigma\varphi)$$

(см. § 1), где c_{σ} удовлетворяют соотношениям (4). Эти решения подчиняются периодическим или антипериодическим условиям²⁾ в зависимости от величины S :

$$\Psi(\varphi+2\pi) = (-1)^{2S} \Psi(\varphi). \quad (11)$$

Значения энергии ϵ спиновой системы, рассмотренной в § 2 (легкоосного парамагнетика) отличаются только знаком от соответствующих собственных значений уравнения (10): $\epsilon = -\kappa$. Т. е. порядки их следования в спектрах взаимно обратны. Для $S=0, 1/2, 1, 3/2$ и 2 явные выражения для собственных значений κ и волновых функций $\Psi(\varphi)$ подобны приведенным в § 1 с изменением номера и знака энергии, а также заменой гиперболических функций на тригонометрические. С другой стороны, эти собственные значения совпадают как по величине, так и по знаку со спектром спинового гамильтониана типа «легкая плоскость» $H = S_z^2 - BS_x$.

Благодаря свойству симметрии потенциала можно перейти от (11) к более привычным граничным условиям. Например, в случае нечетных состояний и целого спина получаем задачу о движении частицы при $0 \leq \varphi \leq \pi$ в потенциальной яме с граничными условиями $\Psi(0) = \Psi(\pi) = 0$. (Аналогичную процедуру можно проделать и в остальных случаях.) Такая переформулировка граничных условий позволяет классифицировать уровни энергии с помощью осцилляционной теоремы, из которой на основании вида волновой функции следует, что спиновой системе отвечают первые $2S+1$ значения κ .

Полученные решения допускают простую интерпретацию на языке зонной картины: они соответствуют значениям квазиимпульса $k=0$ в случае целого спина и $k=1/2$ в случае полуцелого; в картине приведенных зон значениям «энергии» отвечают чередующиеся дно и крыша различных зон. При $B=0$ получается обычная задача о свободном плоском ротаторе для целого S и ротаторе с граничными условиями антипериодичности для полуцелого.

Спектр уравнения Шредингера (1) содержит бесконечное число уровней, причем лишние по отношению к спиновой системе значения энергии ϵ расположены выше ϵ_{2S} . Спектр уравнения (10) с указанными граничными условиями также содержит бесконечное число уровней энергии, однако в силу $\epsilon = -\kappa$ их порядок инвертирован. Значению ϵ_0 энергии основного состояния спиновой системы (имеется в виду парамагнетик типа «легкая ось») соответствует κ_{2S} , а лишние значения энергии расположены ниже ϵ_0 . Спиновой системе отвечают $2S+1$ уровней, являющиеся пересечением обоих множеств.

Спиновой системе с наклонным полем ($C \neq 0$) отвечает уравнение с комплексным периодическим потенциалом, а условие

$$\Psi(\varphi+2\pi) = \exp[i(C/2-S)2\pi] \Psi(\varphi)$$

выделяет в зонном решении вещественные значения энергии. При $S=0$ и $S=1/2$ получаются особенно простые точные решения, аналогичные приведенным в § 2.

²⁾ В дальнейшем для краткости будем говорить просто о периодическом потенциале, не упоминая конкретный вид граничных условий. Заметим, что при $S = -1/2$ уравнение (10) сводится к уравнению Матье.

§ 4. Алгебраическая структура рассматриваемых гамильтонианов

Точные решения уравнения Шредингера для потенциалов, рассматриваемых в данной работе, обнаружены на основе соответствия между координатной и спиновой системами. Оно использовалось до сих пор лишь в плане соотношения между спектрами; энергетические уровни спиновой системы оказались вложенными в полуограниченное множество уровней координатной системы. Представляет интерес, однако, выяснить алгебраический смысл указанного соответствия, связывающего между собой пространства существенно различной природы, одно из которых является конечно-, а другое бесконечномерным. Как мы сейчас увидим, это соответствие существует благодаря тому, что координатный гамильтониан есть комбинация дифференциальных операторов, удовлетворяющих коммутационным соотношениям для компонент спина.

Действительно, как показывает непосредственная проверка, гамильтониан уравнения Шредингера с потенциалом (2) может быть представлен в виде

$$\hat{H} = -\tilde{S}_z^2 - B\tilde{S}_x,$$

где

$$\begin{aligned}\tilde{S}_+ &= \tilde{S}_x + i\tilde{S}_y = \left(S - \frac{B}{2} \operatorname{sh} \xi \right) e^{\xi} - e^{\xi} \frac{d}{d\xi}, \\ \tilde{S}_- &= \tilde{S}_x - i\tilde{S}_y = \left(S + \frac{B}{2} \operatorname{sh} \xi \right) e^{-\xi} + e^{-\xi} \frac{d}{d\xi}, \\ \tilde{S}_z &= \frac{B}{2} \operatorname{sh} \xi + \frac{d}{d\xi},\end{aligned}\tag{12}$$

причем

$$[\tilde{S}_z, \tilde{S}_{\pm}] = \pm \tilde{S}_{\pm}, [\tilde{S}_+, \tilde{S}_-] = 2\tilde{S}_z \text{ и } \tilde{S}^2 = S(S+1).$$

Множество убывающих на бесконечности функций вида (3) образует подпространство, инвариантное относительно действия операторов (12). Аналогичным образом обстоит дело и при наличии «продольного поля» $C \neq 0$.

Операторы (12), выглядящие несколько необычным образом, могут быть получены (с точностью до преобразования подобия) из выражения для генераторов спинорного представления группы вращений [15]

$$S_+ = 2Sz - z^2 \frac{d}{dz}, \quad S_- = \frac{d}{dz}, \quad S_z = z \frac{d}{dz} - S\tag{13}$$

заменой $z = \exp \xi$. Можно показать, что формулы (12), (13) отвечают представлению спиновых когерентных состояний [16], для которого применение этих дифференциальных операторов в соответствующем спиновом подпространстве эквивалентно действию обычных конечномерных спиновых матриц. Волновые же функции (3) являются (с точностью до весового множителя) собственными векторами спинового гамильтониана в представлении спиновых когерентных состояний.

Если в формулах (13) выбрать $z = \exp(i\varphi)$ (где φ вещественно), т. е. меняющимся вдоль окружности единичного радиуса, то приходим к периодическим потенциалам (10). Таким образом, из единой картины с комплексным z и потенциальная яма, и периодический потенциал получаются как два различных, топологически неэквивалентных случая. Напомним, что для каждого из них при соответствующих граничных условиях имеется полуограниченное множество дискретных уровней, пересечение которых дает энергетический спектр спиновой системы, описывающей легкоосный парамагнетик.

С алгебраической точки зрения случаи, рассмотренные в данной работе, отличаются от известных ранее точно решаемых моделей в двух отно-

шениях. Во-первых, роль алгебры, на основе которой удается получить спектр, выполняет алгебра Ли, отвечающая компактной группе $SU(2)$ (тогда как для большинства известных точно решаемых моделей «генерирует спектр» алгебра Ли некомпактной группы $SU(1,1)$ [17]). Во-вторых, сам гамильтониан, благодаря наличию квадратичного по генераторам слагаемого, в эту алгебру не входит, а возможность нахождения точных значений энергии обусловлена конечномерностью соответствующего инвариантного подпространства. Набор генераторов связывает в одно неприводимое представление только те состояния, которые отвечают этому спиновому подпространству.

Если потенциал мало отличается от рассмотренных в работе, то, хотя в общем случае инвариантное конечномерное подпространство отсутствует, и возможность нахождения точных решений теряется, на основе полученных результатов может строиться теория возмущений. Несмотря на то, что при этом точные решения невозмущенной задачи известны только для первых $2S+1$ стационарных состояний, соответствующие поправки дает такой вариант теории возмущений (см., например, [18]), при котором достаточно знать информацию, относящуюся в невозмущенной системе только к рассматриваемому уровню.

До сих пор при изучении соответствия спиновой и координатной систем использовалось представление, в котором диагонально S_z , т. е. квадратичный член в спиновом гамильтониане. Отправляясь от той же спиновой системы, но переходя к представлению, в котором диагонально S_x или S_y , можно прийти к другим, менее наглядным дифференциальным уравнениям.

Заключение

Точные решения уравнения Шредингера известны для крайне ограниченного числа задач. Поэтому нахождение новых точно решаемых случаев само по себе представляет принципиальный интерес. Кроме того, найденные примеры потенциалов обладают рядом важных и весьма необычных свойств, отличающих их от ранее известных точно решаемых моделей.

1) Для всех трех классов форма потенциалов может существенно меняться в зависимости от параметров. Особенно интересно, что при этом могут получаться двойные ямы — симметричная и несимметричная, а также яма с четверным минимумом.

2) Далее, имеется непосредственная связь между задачами о движении в полях типа потенциальных ям и полях с периодическими потенциалами. При этом четверному минимуму в ξ -представлении соответствует четверной максимум в φ -представлении. Подчеркнем, что среди известных ранее периодических полей, по-видимому, вовсе нет моделей с точным аналитическим выражением для уровней энергии, кроме тривиального случая свободного ротатора (например, в модели Кронига — Пенни явный вид для значений энергии отсутствует).

3) Найденные классы потенциальных полей имеют конкретный физический смысл, описывая поведение анизотропного парамагнетика во внешнем магнитном поле. Аналогичный псевдоспиновый гамильтониан возникает также в одной из моделей взаимодействующих фермионов [19], используемой в ядерной физике. Особенно интересно, что тем самым обнаружены случаи, когда непосредственные приложения находят потенциалы с четверным минимумом и четверным максимумом.

4) В рассмотренных задачах определенный интерес представляют не только сами точные решения, но и алгебраическая природа гамильтонианов, а также соответствующий ей метод отыскания этих решений на основе аппарата обобщенных когерентных состояний.

Кроме того, заслуживает внимания сам способ исследования спиновых систем при помощи эффективных потенциальных полей.

Полученные результаты могут оказаться полезными в разнообразных физических ситуациях, где задача сводится к изучению движения частицы в потенциальных полях, подобных рассмотренным в данной работе, особенно, когда профиль поля имеет вид двойной потенциальной ямы. Это относится (кроме упоминавшегося выше примера [4]) к использованию эффективных потенциалов в квантовой теории колебаний молекул (скажем, при описании инверсионного расщепления в аммиаке [20]), в теории металлов (при исследовании траекторий с самопересечением и близких к ним в фазовом пространстве для произвольного закона дисперсии в магнитном поле [21], в теории поля, где ангармонический осциллятор служит простейшим модельным примером [22] (в частности, при рассмотрении систем со спонтанно нарушенной симметрией) и т. д. (см., например, [23, 24]).

Наконец, точные решения позволяют проверять эффективность различных аналитических приближенных и численных методов исследования уравнения Шредингера.

Подводя итоги, подчеркнем, что ограничение низколежащими состояниями для рассмотренных классов потенциальных полей с точными решениями полностью окупается богатством свойств, которыми они обладают.

Возникает вопрос о возможности обобщения результатов и методов данной работы, в частности, на многомерные случаи, с использованием алгебр Ли, отвечающих более сложным компактным группам, чем $SU(2)$.

Авторы выражают искреннюю признательность В. М. Цукернику, стимулировавшему выполнение данной работы, за обсуждение результатов, а также Л. И. Глазману и Ю. П. Степановскому за полезные замечания.

Литература

1. Маттис Д. Теория магнетизма. М.: Наука, с. 255.
2. Абрагам А., Блани Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов, т. 1, М.: Мир, 1972, с. 152.
3. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика, ч. 2. М.: Наука, 1978, с. 354.
4. Заславский О. Б., Ульянов В. В., Цукерник В. М. ФНТ, 1983, 9, 511.
5. Ульянов В. В. Интегральные методы в квантовой механике. Харьков: Вища школа, 1982, с. 120.
6. Stenholm S. Phys. Rept. C, 1973, 6, 1.
7. Постон Т., Стьюарт И. Теория катастроф и ее приложения. М.: Мир, 1980, с. 107.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982, с. 204.
9. Witten E. Nucl. Phys. B, 1981, 188, 513. Генденштейн Л. Э. Письма в ЖЭТФ, 1983, 38, 299.
10. Комаров И. В., Пономарев Л. И., Славянов С. Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976, с. 141.
11. Филатова Л. Д., Цукерник В. М. ЖЭТФ, 1969, 56, 1290; Розенфельд Е. В. Письма в ЖЭТФ, 1976, 24, 60.
12. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974, с. 96.
13. Флюгге Э. Задачи по квантовой механике. Т. I. М.: Мир, 1974, с. 102.
14. Zheng W. M. J. Phys. A, 1983, 16, 43.
15. Наймарк М. А. Линейные представления группы Лоренца. М.: Физматгиз, 1958, с. 55.
16. Переломов А. М. УФН, 1977, 123, с. 23.
17. Cordero P., Furlan P., Ghirardi G. C., Hojman S. Nuovo cim., 1971, 3A, 807.
18. Турбинер А. В. ЖЭТФ, 1980, 79, 1719.
19. Lipkin H. J., Meshkov N., Glick A. J. Nucl. Phys., 1965, 62, 188.

20. Волькенштейн М. В., Грибов Л. А., Ельяшевич М. А., Степанов Б. И. Колебания молекул. М.: Наука, 1972, с. 84.
21. Лифшиц П. М., Азбель М. Я., Каганов М. И. Электронная теория металлов. М.: Наука, 1971, с. 64.
22. Bender G. M., Wu T. T. Phys. Rev., 1969, **184**, 1231.
23. Somorjai R. L., Hornig D. F. J. Chem. Phys., 1962, **36**, 1980.
24. Chan S. I., Stelman D., Thompson L. E. J. Chem. Phys., 1964, **41**, 2828.

Харьковский государственный университет
им. А. М. Горького

Поступила в редакцию
14.III.1984

Примечание при корректуре (30 сентября 1984 г.). Как недавно стало известно авторам, в работах Razavy M. (Am. J. of Phys., 1980, **48**, 285; Phys. Lett., 1981, **82A**, 7) на основе метода степенных рядов рассматривались решения уравнения Шредингера, аналогичные нашему однопараметрическому случаю ($c=0$).

NEW CLASSES OF EXACT SOLUTIONS OF THE SCHROEDINGER EQUATION AND A DESCRIPTION OF SPIN SYSTEMS BY MEANS OF POTENTIAL FIELDS

O. B. Zaslavsky, V. V. Ulyanov

New classes of exact solutions of the stationary one-dimensional Schroedinger equation are found for fields of the potential well or periodic potential types. The solutions refer to the $2S+1$ lower energy levels (S is an integer or half-integer entering the potential) which correspond to the eigen values of the spin hamiltonian describing an anisotropic paramagnet of spin S in an external magnetic field. The potentials found are one- and two-parametric (for a fixed value of S) and their shape and the structure of the energy spectrum vary pronouncedly depending on the values of the parameters. In particular, a symmetric and asymmetric wells with two minima and a well with a fourfold minimum are obtained. Simple exact analytic expressions for the wave functions and energy values in the one-parameter case, for example, obtain for $S=0, 1/2, 1, 3/2, 2$. The correspondence between the coordinate and spin systems is due to the fact that the coordinate hamiltonian may be represented as a combination of linear differential operators satisfying the commutation rules for the spin components.

New classes of exact solutions of the Schrödinger equation and potential-field description of spin systems

O. B. Zaslavskii and V. V. Ul'yanov

A. M. Gor'kii Khar'kov State University

(Submitted 14 March 1984)

Zh. Eksp. Teor. Fiz. **87**, 1724–1733 (November 1984)

New classes of exact solutions of the steady-state, one-dimensional Schrödinger equation are found for fields corresponding to potential wells or periodic potentials. These solutions refer to the $2S + 1$ lowest energy levels (S is an integer or half-integer which appears in the potentials) which correspond to the eigenvalues of the spin Hamiltonian describing an anisotropic paramagnet of spin S in an external magnetic field. The potentials found are one- and two-parameter potentials (at a fixed value of S). Their form and the structure of the energy spectrum vary substantially with the parameter values. In particular, a symmetric well and an asymmetric one with two minima are found, as is a well with a fourfold minimum. There are simple and exact analytic expressions for the wave functions and the energies in, for example, the single-parameter case with $S = 0, 1/2, 1, 3/2$, and 2 . The coordinate and spin systems are related because the coordinate Hamiltonian can be written as a combination of linear differential operators which satisfy commutation relations for the spin components.

A description of the dynamic interaction which is widely used in the theory of magnetism involves only the coordinate degrees of freedom in terms of spin variables. This description is generally only approximate and involves physical assumptions of some sort: that an average can be taken over the orbital variables, that perturbation theory is applicable, etc. (a good example is the Heisenberg Hamiltonian¹⁻³). There are, on the other hand, cases of a spin-coordinate correspondence with a rigorous meaning, in which the coordinate Hamiltonian can be expressed directly in terms of differential operators which actually serve as effective-spin operators (§4 of this paper).

It was shown in Ref. 4 that the energy spectrum of the spin Hamiltonian describing a paramagnet with an easy-axis anisotropy in an external magnetic field directed perpendicular to the easy axis reproduces the first $2S + 1$ energy levels of a particle moving in a potential well of a certain type (S is the spin). In this case we are dealing with the inverse transformation—from a discrete spin space to coordinate space—and an extremely unusual example of the effective-field method⁵ (which proves useful here in a study of the low-temperature properties of a paramagnet with $S \gg 1$). For the coordinate system we therefore find a new class of exact solutions of the Schrödinger equation. Of particular interest are cases in which the spin is not very large, so that the characteristic equations in spin space have simple explicit solutions. There is a similar spin-coordinate correspondence for an anisotropic paramagnet in a magnetic field in an arbitrary direction.

We proceed to a specific analysis of the exact solutions, which, as we will see, fall naturally into three classes.

§1. CLASS OF EXACT SOLUTIONS FOR SYMMETRIC POTENTIALS

We consider the steady-state Schrödinger equation for a particle which is moving in a one-dimensional potential field:

$$\Psi'' + [\varepsilon - U(\xi)] \Psi = 0 \quad (1)$$

(for simplicity, we use dimensionless energies and a dimensionless coordinate ξ), where the potential is constructed from hyperbolic functions and has two parameters (B and S),

$$U(\xi) = \frac{B^2}{4} \operatorname{sh}^2 \xi - B \left(S + \frac{1}{2} \right) \operatorname{ch} \xi. \quad (2)$$

Exact solutions of this equation cannot in general be found. However, let us assume that we have an integer or half-integer value $S \geq 0$, and let us assume $B > 0$. Direct substitution then shows that Eq. (1) has solutions of the form

$$\Psi(\xi) = \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \sum_{\sigma=-S}^S \frac{c_\sigma}{((S-\sigma)!(S+\sigma)!)^{1/2}} \exp(\sigma \xi), \quad (3)$$

where the coefficients c_σ satisfy the system of finite-order linear equations

$$\begin{aligned} (\varepsilon + \sigma^2) c_\sigma + \frac{B}{2} [((S-\sigma)(S+\sigma+1))^{1/2} c_{\sigma+1} \\ + ((S+\sigma)(S-\sigma+1))^{1/2} c_{\sigma-1}] = 0, \\ c_{S+1} = c_{-S-1} = 0; \quad \sigma = -S, -S+1, \dots, S, \end{aligned} \quad (4)$$

and the energy levels are found from the corresponding characteristic equation. We can conclude from the oscillation theorem that such solutions correspond to only the first $2S + 1$ energy levels for Schrödinger equation (1).

It can be seen that the problem of solving system (4) is equivalent to that of finding the eigenvalues of the dimensionless spin Hamiltonian $H = -S_z^2 - BS_x$, where the operators S_x and S_z represent the corresponding projections of the spin S , c_σ is the wave function in the S_z representation, and B is proportional to the magnetic field.¹ (The questions of an algebraic nature which arise here are discussed in §4.)

For each fixed integer or half-integer value of S , expression (2) determines a family of potential fields which depend on the one parameter B ; a variation of this parameter leads to an extremely important deformation of the potential profile.

If $B > B_0 \equiv 2S + 1$, the potential is a single well with a simple minimum; if $B < B_0$, the potential becomes a well with two minima; and at $B = B_0$ we find a well with a fourfold minimum.

We mentioned above that in problems of this case there are exact solutions for only a limited number of low-lying energy levels. If S is not too large, the wave functions and the energies can be described by simple explicit expressions. These cases are of particular interest, since it is usually the low-lying states which are the subject of a purely quantum analysis (while good results on high-lying states can be found by a semiclassical approach).

System of linear equations (4) can be split up into two simpler systems: The states which are of even parity in σ separate from those of odd parity. For an integer spin and even states, for example, there are $S + 1$ instead of $2S + 1$ equations. We will discuss some examples of the simple, explicit analytic expressions which can be found for the energy levels and wave functions of the stationary states.

If $S = 0$ (a trivial case for a spin system, but in the coordinate picture the potential undergoes changes in shape which are also typical of other values of S), the ground-state energy $\varepsilon_0 = 0$ is independent of B , and

$$\Psi_0(\xi) = A_0 \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right).$$

In the case $S = 1/2$ the corresponding quantities are

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= -\frac{1}{4} - \frac{B}{2}; & \Psi_0(\xi) &= A_0 \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \operatorname{ch} \frac{\xi}{2}; \\ \varepsilon_1 &= -\frac{1}{4} + \frac{B}{2}; & \Psi_1(\xi) &= A_1 \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \operatorname{sh} \frac{\xi}{2}. \end{aligned} \quad (5)$$

For $S = 1$ we find, combining states with the same parity,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,2} &= -\frac{1}{2} \mp (B^2 + \frac{1}{4})^{1/2}; \\ \Psi_{0,2}(\xi) &= A_{0,2} \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \left(1 - \frac{\varepsilon_{0,2}}{B} \operatorname{ch} \xi\right); \\ \varepsilon_1 &= -1; & \Psi_1(\xi) &= A_1 \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \operatorname{sh} \xi \end{aligned} \quad (6)$$

(here and below, the upper sign corresponds to the index at the left).

The case $S = 3/2$ is of particular interest since it corresponds to the maximum number of exact solutions for the energy which are simple, explicit expressions and which comprehensively convey the characteristic features of the energy spectrum. In this case we have

$$\begin{aligned} \varepsilon_{0,2} &= -\frac{5}{4} - \frac{B}{2} \mp (B^2 - B + 1)^{1/2}; \\ \Psi_{0,2}(\xi) &= A_{0,2} \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \\ &\quad \times \left[\operatorname{ch} \frac{3\xi}{2} - \frac{2}{B} \left(\varepsilon_{0,2} + \frac{9}{4}\right) \operatorname{ch} \frac{\xi}{2} \right]; \\ \varepsilon_{1,3} &= -\frac{5}{4} + \frac{B}{2} \mp (B^2 + B + 1)^{1/2}; \\ \Psi_{1,3}(\xi) &= A_{1,3} \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \end{aligned} \quad (7)$$

$$\times \left[\operatorname{sh} \frac{3\xi}{2} - \frac{2}{B} \left(\varepsilon_{1,3} + \frac{9}{4}\right) \operatorname{sh} \frac{\xi}{2} \right].$$

If $S = 2$, simple results can be found for the odd-parity stationary states, since the characteristic equation in this case is quadratic (cubic for the states of even parity):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,3} &= -\frac{5}{2} \mp \left(B^2 + \frac{9}{4}\right)^{1/2}; & \Psi_{1,3}(\xi) \\ &= A_{1,3} \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi\right) \left[\operatorname{sh} 2\xi - \frac{2}{B} (\varepsilon_{1,3} + 4) \operatorname{sh} \xi \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

The energy spectrum has some general properties which are not restricted to integer or half-integer values of S . The deformation of the potential profile which we mentioned earlier is accompanied by a substantial change in the spectral structure. At $B \gtrsim B_0$ the spectrum is a fan of levels which, in a first approximation, depend linearly on B , while at $B = B_0$ the spectrum is that of an oscillator with a pronounced (fourfold) nonlinearity. Curiously, although we know that there are no exact solutions for a potential $U(\xi) = \beta \xi^4$, exact solutions can be found for the more complicated function $B_0^2 \sinh^4(\xi/2)$ (for the low-lying states).

At small values of B the spectrum consists of a set of levels of spin origin (for integer or half-integer values of S) which move closer together in pairs and which correspond to two symmetrically positioned solitary (in the limit $B = 0$) Morse potential wells and "superspin" levels which form a quasicontinuous part of the spectrum and which become more closely spaced toward a zero energy.

These changes in the shape of the potential and in the nature of the energy spectrum have such physical consequences for the corresponding spin system as the existence of a maximum in the low-temperature magnetic susceptibility as a function of the magnetic field.⁴

§2. CLASS OF ASYMMETRIC POTENTIALS

The results derived in §1 are generalized to the case of potentials of the form

$$U(\xi) = \frac{B^2}{4} \left(\operatorname{sh} \xi - \frac{C}{B} \right)^2 - B \left(S + \frac{1}{2} \right) \operatorname{ch} \xi, \quad (9)$$

which, in contrast with (2), are asymmetric and contain two varying parameters $B > 0$ and $C > 0$, at a fixed value of S . The wave functions of the first $2S + 1$ levels differ from (3) by a factor of $\exp(C\xi/2)$, and the quantities c_σ satisfy an equation similar to (4), differing only by an additional term σC in the coefficient of c_σ .

In this case the potential profile differs substantially, depending on whether the point on the B, C plane corresponding to the system lies inside, outside, or on the astroid $B^{2/3} + C^{2/3} = B_0^{2/3}$. In the first of these cases, the potential is a well with two minima; in the second, it is a well with a single minimum; and in the third the maximum and the nearest minimum merge, forming an inflection point with a horizontal slope. The point $C = 0$, $B = B_0$ on the astroid corresponds to the critical field for the symmetric case.

Interestingly, the deformation of the potential profile which we mentioned above is a typical example of the transformations which are analyzed in catastrophe theory, name-

ly a cusp catastrophe, the simplest realization of which is in a so-called Ziman's machine.⁷

Potential (9) corresponds to the dimensionless spin Hamiltonian $H = -S_z^2 - BS_x - CS_z$, which describes an anisotropic easy-axis paramagnet, where B and C are proportional to the transverse and longitudinal components of the magnetic field, respectively. This astroid equation is a quantum generalization of the equation which separates the region of metastable states for a paramagnet of this type in the classical case.⁸

The even states do not separate from the odd states in the characteristic equation now, in contrast with (4), since the order of the equation is $2S + 1$. We can give some simple exact solutions for the cases $S = 0$ [in which the potentials in (6) and (2) take a form associated with a supersymmetric quantum mechanics⁹] and $S = 1/2$.

In the former case, the solution is

$$\varepsilon_0 = 0; \quad \Psi_0(\xi) = A_0 \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi + \frac{C}{2} \xi\right),$$

and in the latter it is

$$\varepsilon_{0;1} = -\frac{1}{4} \mp \frac{(B^2 + C^2)^{1/2}}{2}; \quad \Psi_{0;1}(\xi) = A_{0;1} \exp\left(-\frac{B}{2} \operatorname{ch} \xi + \frac{C}{2} \xi\right) \left(e^{\xi/2} - \frac{C \mp (B^2 + C^2)^{1/2}}{B} e^{-\xi/2}\right).$$

Among the special functions, the spheroidal Coulomb functions¹⁰ are the closest approximations of these solutions with $C = 0$. The case $C \neq 0$ gives us one generalization of this class of special functions.

The energy spectrum has several extremely interesting properties, not found in the case of symmetric potential (2), which can be seen best in the limit $B = 0$. For example, there is the unusual behavior of the levels $\varepsilon_n(C)$ as a function of C . In the region $C \leq 2S$, where the potential takes the form of two solitary Morse wells of different depths, the energy levels turn out to be doubly degenerate for certain integer values of C . As a result, we find a discontinuous behavior for all the levels $\varepsilon_n(C)$ except the ground level, whose energy falls off monotonically with increasing C : $\varepsilon_0 = -S^2 - CS$. Since the points of discontinuity, $\varepsilon_n(C)$, pertain to excited states, there are no discontinuities in the magnetization at low temperatures (in the case of an easy-plane spin Hamiltonian, in contrast, there are discontinuities,¹¹ since the behavior of the ground level is discontinuous).

If $B \neq 0$ the degeneracy is lifted, and the corresponding levels "repel each other."

Typical of the behavior of the spectrum in strong "fields" is a linear dependence of the energy levels on the "intensity" $(B^2 + C^2)^{1/2}$.

We wish to emphasize the following distinctions between the classes of potential fields discussed above and the standard, exactly solvable quantum-mechanical models.^{12,13} In the first place, the latter are actually one-parameter models and can be written in the form $U(x) = U_0 f(x/a)$. As the parameter U_0 is varied there is a change in the "intensity" but not the shape of the potential. Examples of these models are the Eckart and Morse potentials

$$-U_0/ch^2 x/a, \quad U_0[\exp(-2x/a) - 2\exp(-x/a)].$$

The power-law models (the simple harmonic oscillator, the quaternary oscillator, and a linear potential), in contrast, contain essentially no parameter, since the Schrödinger equation in dimensionless variables is of the form $\Psi'' + (\varepsilon - \xi^m)\Psi = 0$.

On the other hand, the models of spin origin in which we are interested in the present paper are far richer in possibilities. The shape of the potential, for example, can change substantially even in the one-parameter case, i.e., with $C = 0$. The models with $C \neq 0$, in contrast, which give rise to a two-parameter potential (for a given value of S), apparently have no analogs of any sort among simple models of potential fields. Exact solutions for asymmetric double wells were found in Ref. 14, but the potential was expressed in a complicated way in terms of the confluent hypergeometric function, although the spectrum is analogous to the energy levels of a simple harmonic oscillator.

Second, in the case at hand the spectrum is completely discrete, and the potentials have no singularities. In this regard the symmetric potentials which have been found could be compared with only one of the standard, exactly solvable models: the simple harmonic oscillator. As we have already emphasized, however, the profile of the simple harmonic oscillator is fixed, and the energy spectrum has an unambiguous structure.

§3. PERIODIC POTENTIALS WITH EXACT SOLUTIONS

Up to this point we have studied the Schrödinger equation for well potentials; the discrete spectrum has been found as a consequence of the decay of the wave function at infinity. It turns out that there also exists a class of periodic potentials which allow exact solutions and which have a direct relationship with a spin system. The corresponding Schrödinger equation is

$$\frac{d^2\Psi}{d\varphi^2} + \left[\kappa - \frac{B^2}{4} \sin^2\varphi - B\left(S + \frac{1}{2}\right) \cos\varphi\right] \Psi = 0. \quad (10)$$

This equation can be derived from (1) and (2) through the formal substitution $\xi \rightarrow i\varphi$. The wave functions for the energies which belong to the spectrum of the corresponding spin system are

$$\Psi(\varphi) = \exp\left(-\frac{B}{2} \cos\varphi\right) \sum_{\sigma=-S}^S \frac{c_\sigma}{((S-\sigma)!(S+\sigma)!)^{1/2}} \exp(i\sigma\varphi)$$

(see §1), where the c_σ satisfy relations (4). These solutions obey periodic or antiperiodic conditions,² depending on S :

$$\Psi(\varphi + 2\pi) = (-1)^{2S} \Psi(\varphi). \quad (11)$$

The energies ε of the spin system studied in §2 (an easy-axis paramagnet) differ only in sign from the corresponding eigenvalues of Eq. (10): $\varepsilon = -\kappa$. In other words, they appear in exactly the opposite order in the spectra. For $S = 0, 1/2, 1, 3/2$, and 2 the explicit expressions for the eigenvalues κ and the wave functions $\Psi(\varphi)$ are similar to those in §1, with changes in the index and the sign of the energy, and with the replacement of the hyperbolic functions by trigonometric functions. On the other hand, these eigenvalues agree in both

magnitude and sign with the spectrum of an easy-plane spin Hamiltonian $H = S_z^2 - BS_x$.

By virtue of the symmetry of the potential we can transform from (11) to more-customary boundary conditions. For example, for odd states and integer spin we find the problem of the motion of a particle with $0 \leq \varphi \leq \pi$ in a potential well with the boundary conditions $\Psi(0) = \Psi(\pi) = 0$ (an analogous procedure can be followed in the other cases). This reformulation of the boundary conditions allows us to classify the energy levels on the basis of an oscillation theorem, from which it follows that the form of the wave function implies that the spin system corresponds to the first $2S + 1$ values of κ .

The solutions found here can be interpreted quite simply in terms of an energy-band diagram: They correspond to quasimomentum values $k = 0$ in the case of an integer spin and $k = 1/2$ in the case of a semi-integer spin; in the reduced-band diagram, the "energies" correspond to the alternating bottom and top of different bands. For $B = 0$ we find the usual problem of a free plane rotator for integer S or a rotator with antiperiodic boundary conditions for semi-integer S .

The spectrum of Schrödinger equation (1) contains an infinite number of levels; the energies ε which are not pertinent to the spin system lie above ε_{2S} . The spectrum of Eq. (10) with these boundary conditions also contains an infinite number of energy levels, but in the opposite order because of the relation $\varepsilon = -\kappa$. The ground-state energy (ε_0) of the spin system (for an easy-axis paramagnet) corresponds to κ_{2S} , and the "extra" energies lie below ε_0 . The $2S + 1$ levels which are the intersection of the two sets correspond to the spin system.

An equation with a complex periodic potential corresponds to a system with an oblique field ($C \neq 0$), and the condition

$$\Psi(\varphi + 2\pi) = \exp[i(C/2 - S)2\pi] \Psi(\varphi)$$

singles out real values of the energy in the band solution. With $S = 0$ and $S = 1/2$ we find particularly simple exact solutions, similar to those in §2.

4. ALGEBRAIC STRUCTURE OF THESE HAMILTONIANS

The exact solutions of the Schrödinger equation for the potentials considered here have been found on the basis of the correspondence between the coordinate and spin systems. Up to this point, this correspondence has been used only in terms of the correspondence between spectra; the energy levels of the spin system have been embedded in a semi-infinite set of levels of the coordinate system. It is also interesting to determine the algebraic meaning of this correspondence between spaces of quite different natures, one finite-dimensional and the other infinite-dimensional. As we will now see, this correspondence exists because the coordinate Hamiltonian is a combination of differential operators which satisfy commutation relations for the spin components.

A direct check shows that the Hamiltonian of the Schrödinger equation with potential (2) can be written in the form

$$\tilde{H} = -\tilde{S}_z^2 - B\tilde{S}_x,$$

where

$$\begin{aligned} \tilde{S}_+ &= \tilde{S}_x + i\tilde{S}_y = \left(S - \frac{B}{2} \operatorname{sh} \xi\right) e^{\xi} - e^{\xi} \frac{d}{d\xi}, \\ \tilde{S}_- &= \tilde{S}_x - i\tilde{S}_y = \left(S + \frac{B}{2} \operatorname{sh} \xi\right) e^{-\xi} + e^{-\xi} \frac{d}{d\xi}, \\ \tilde{S}_z &= \frac{B}{2} \operatorname{sh} \xi + \frac{d}{d\xi}, \end{aligned} \quad (12)$$

and where

$$[\tilde{S}_z, \tilde{S}_{\pm}] = \pm \tilde{S}_{\pm}, [\tilde{S}_+, \tilde{S}_-] = 2\tilde{S}_z \text{ and } \tilde{S}^2 = S(S+1).$$

The set of functions of the type in (3) which decay at infinity forms a subspace which is invariant under the action of operators (12). There is a similar situation when a "longitudinal field" is present ($C \neq 0$).

The operators in (12), which look slightly unusual, can be found (within a similarity transformation) from the expression for the generators of the spinor representation of the rotation group,¹⁵

$$S_+ = 2Sz - z^2 \frac{d}{dz}, \quad S_- = \frac{d}{dz}, \quad S_z = z \frac{d}{dz} - S \quad (13)$$

through the substitution $z = \exp \xi$. It can be shown that Eqs. (12) and (13) correspond to the representation of coherent spin states,¹⁶ for which the use of these differential operators in the corresponding spin subspace is equivalent to the use of ordinary finite-dimensional spin matrices. The wave functions in (3), on the other hand, are (within a weight factor) the eigenvectors of the spin Hamiltonian in the representation of coherent spin states.

If we choose $z = \exp(i\varphi)$ (where φ is real) in (13), i.e., if we choose z to vary along a circle of unit radius, we arrive at periodic potentials (10). Accordingly, from a single picture with a complex z , both a potential well and a periodic potential emerge as two different, topologically nonequivalent cases. We recall that for each of these cases there is a semi-infinite set of discrete levels, and the intersection of these sets gives us the energy spectrum of the spin system describing an easy-axis paramagnet.

From the algebraic standpoint, the cases we have considered here differ from the known exactly solvable models in two regards. First, the role of the algebra on whose basis the spectrum is found is played by a Lie algebra on whose basis the spectrum is found is played by a Lie algebra corresponding to the compact group $SU(2)$ [while for most of the known exactly solvable models, it is the Lie algebra of the noncompact group $SU(1,1)$ which "generates the spectrum"¹⁷]. Second, the Hamiltonian itself does not enter this algebra because of the term which is quadratic in the operators, and the possibility of finding the exact energies stems from the finite dimensionality of the corresponding invariant subspace. The set of generators relates in a single irreducible representation only those states which correspond to this spin subspace.

If a potential differs only slightly from those considered here, a perturbation theory can be constructed from these results, even though there will generally be no invariant, fin-

ite-dimensional subspace, and it will not be possible to find exact solutions. Although exact solutions of the unperturbed problem are known for only the first $2s + 1$ stationary states, the appropriate corrections will produce a perturbation theory (see ref. 18, for example) in which it is sufficient to have information on only the particular level of the unperturbed system which is under consideration.

Up to this point in our study of the correspondence between the spin and coordinate systems we have used a representation in which S_z is diagonal, i.e., the quadratic term in the spin Hamiltonian. By working from the same spin system, but transforming to a representation in which S_x or S_y is diagonal, we can find other, less graphic differential equations.

CONCLUSION

Exact solutions of the Schrödinger equation are known for only an extremely few problems, so that finding new exactly solvable cases is of fundamental interest in its own right. Furthermore, the illustrative potential found here have several important and extremely unusual problems which distinguish them from other known exactly solvable models.

1) For all three classes, the shape of the potential can vary substantially with the parameter values. A particularly interesting result is that double wells—symmetric and asymmetric—and a well with a fourfold minimum can be found.

2) Furthermore, there is a direct relationship between problems involving motion in potential-well fields and in fields with periodic potentials. The fourfold minimum in the ξ representation corresponds to a fourth maximum in the φ representation. We wish to emphasize that among all of the previously known periodic fields there are apparently none with an exact analytic expression for the energy levels except the trivial case of a free rotator (e.g., there is no explicit expression for the energies in the Kronig-Penney model).

3) The classes of potential fields found here have a specific physical meaning, describing the behavior of an anisotropic paramagnet in an external magnetic field. A similar pseudospin Hamiltonian arises in one of the models of interacting fermions¹⁹ which is used in nuclear physics. It is particularly interesting to note that in this manner we find cases in which potentials with a fourth minimum and a fourth maximum have direct applications.

4) In these problems there is definite interest in not only the exact solutions themselves but also in the algebraic nature of the Hamiltonians and in the particular method (corresponding to this algebraic nature) which is used to seek these solutions with the apparatus of generalized coherent states.

Another point which deserves attention is the very method used to study spin systems with the help of effective potential fields.

The results derived here may also prove useful in a variety of physical situations in which the problem reduces to studying the motion of a particle in potential fields similar to those discussed here, especially if the field profile is a double potential well. This comment applies not only to the example

mentioned above⁴ but also to use of effective potentials in the quantum theory of molecular vibrations (in, say, a description of the inversion splitting in ammonia²⁰), in the theory of metals (in a study of self-intersecting trajectories and nearby trajectories in phase space for an arbitrary dispersion law in a magnetic field²¹), in field theory, where the anharmonic oscillator is a simple model case²² (in particular, in the study of systems with spontaneous symmetry breaking), etc. (see Refs. 23 and 24, for example).

Finally, the exact solutions can be used to test the effectiveness of various analytic approximations and numerical methods for studying the Schrödinger equation.

We wish to emphasize that the restriction to low-lying states for these classes of potential fields with exact solutions is completely justified by the rich set of properties of these solutions.

These is the question of whether the results and methods of this study can be generalized, in particular, to multidimensional cases by using Lie algebras corresponding to compact groups more complex than $SU(2)$.

We wish to thank V. M. Tsukernik, who stimulated this study, for a discussion of its results. We also thank L. I. Glazman and Yu. P. Stepanovskii for useful comments.

¹⁹In the transformation from a spin system to a coordinate system, the approach of introducing a generating function like (3) is analogous to, for example, the transformation of Ref. 6, used to study the Dicke model.

²⁰For brevity we refer to simply "a periodic potential," without specifying the form of the boundary conditions. In the case $S = -1/2$, Eq. (10) reduces to the Mathieu equation.

¹D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism*, Harper and Row, New York (1965) (Russ. transl. Nauka, Moscow, 1967, p. 255).

²A. Abragam and B. Bleaney, *Electron Paramagnetic Resonances of Transition Ions*, Clarendon Press, Oxford (1970) (Russ. transl. Mir, Moscow, 1972, p. 152).

³E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, *Statisticheskaya fizika* (Statistical Physics), Nauka, Moscow, 1978, Part 2, p. 354 [transl.: Pergamon, 1981].

⁴O. B. Zaslavskii, V. V. Ul'yanov, and V. M. Tsukernik, *Fiz. Nizk. Temp.* **9**, 511 (1983) [Sov. J. Low Temp. Phys. **9**, 259 (1983)].

⁵V. V. Ul'yanov, *Integral'nye metody v kvantovoi mekhanike* (Integral Methods in Quantum Mechanics), Vishcha shkola, Khar'kov, 1982, p. 120.

⁶S. Stenholm, *Phys. Rep.* **C6**, 1 (1973).

⁷T. Poston and I. Stewart, *Catastrophe Theory and Its Applications*, Fearon Pitman, Belmont, Calif., 1978 (Russ. Transl. Mir, Moscow, 1980).

⁸L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Élektrodinamika sploshnykh sred*, Nauka, Moscow, 1982, p. 204 (Electrodynamics of Continuous Media, Pergamon Press, Oxford).

⁹E. Witten, *Nucl. Phys.* **B188**, 513 (1981); L. É. Gendenshtein, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **38**, 299 (1983) [JETP Lett. **38**, 356 (1983)].

¹⁰I. V. Komarov, L. I. Ponomarev, and S. Yu. Slavyanov, *Sferoidal'nye i kulonovskie sferoidal'nye funktsii* (Spheroidal and Coulomb Spheroidal Functions), Nauka, Moscow, 1976, p. 141.

¹¹L. D. Filatova and V. M. Tsukernik, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **56**, 1290 (1969) [Sov. Phys. JETP **29**, 694 (1969)]; E. V. Rozenfel'd, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **24**, 60 (1976) [JETP Lett. **24**, 50 (1976)].

¹²L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Kvantovaya mekhanika*, Nauka, Moscow, 1974, p. 96 (Quantum Mechanics, Pergamon Press, Oxford).

¹³S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin (1971) (Russ. transl. Mir, Moscow, 1974, p. 102).

¹⁴W. M. Zheng, *J. Phys. A* **16**, 43 (1983).

¹⁵M. A. Naimark, *Lineinye predstavleniya gruppy Lorentsa* (Linear Representations of the Lorentz Group, Pergamon, New York, 1964) *Fiz-*

- matgiz, Moscow, 1958, p. 55.
- ¹⁶A. M. Perelomov, *Usp. Fiz. Nauk* **123**, 23 (1977) [*Sov. Phys. Usp.* **20**, 703 (1977)].
- ¹⁷P. Cordero, P. Furlan, G. C. Ghirardi, and S. Hojman, *Nuovo Cimento* **3A**, 807 (1971).
- ¹⁸A. V. Turbiner, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **79**, 1719 (1980) [*Sov. Phys. JETP* **52**, 868 (1980)].
- ¹⁹H. J. Lipkin, N. Meshkov, and A. J. Glick, *Nucl. Phys.* **62**, 188 (1965).
- ²⁰M. V. Vol'kenshtein, L. A. Gribov, M. A. El'yashevich, and B. I. Stepanov, *Kolebaniya molekul* (Molecular Vibrations), Nauka, Moscow, 1972, p. 84.
- ²¹I. M. Lifshitz, M. Ya. Azbel', and M. I. Kaganov, *Elektronnaya teoriya metallov* (Electron Theory of Metals), Nauka, Moscow, 1971, p. 64. [Consultants Bureau, 1973].
- ²²G. M. Bender and T. T. Wu, *Phys. Rev.* **184**, 1231 (1969).
- ²³R. L. Somorjai and D. F. Hornig, *J. Chem. Phys.* **36**, 1980 (1962).
- ²⁴S. I. Chan, D. Stelman, and L. E. Thompson, *J. Chem. Phys.* **41**, 2828 (1964).

Translated by Dave Parsons

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И
МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК)

5

МОСКВА · 1987

ПЕРИОДИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ДЛЯ СПИНОВЫХ СИСТЕМ И НОВЫЕ ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН

Заславский О. Б., Ульянов В. В.

С помощью техники, развитой в предыдущей работе авторов и использующей представление обобщенных когерентных состояний, найдены новые эффективные периодические потенциальные поля, строго описывающие стационарные состояния (псевдо)спиновых систем типа двухосного парамагнетика в магнитном поле. Потенциалы существенно изменяются в зависимости от нескольких параметров, их профили изобилуют особыми формами типа двойной ямы, двугорбого барьера, четверных минимумов и максимумов, а в зонах происходят интересные структурные превращения (конечнозонность, спаривание зон и т. п.). Показано, что спиновой системе отвечают (анти)периодические решения с крайними энергетическими уровнями в $2S+1$ низших зонах (S — спин). На основе установленного спин-координатного соответствия обнаружены новые классы точных решений уравнения Шредингера для энергетических зон с простыми явными выражениями для уровней энергии и волновых функций при $S=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \frac{7}{2}, 4, \frac{9}{2}, 5$. Потенциалы выражаются через эллиптические функции и содержат как различные частные случаи конечнозонный потенциал Ламе — Айнса, потенциалы Эккарта и Морса. Эффективные потенциалы построены также для гамильтонианов группы $SU(1,1)$.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время существенно возрос интерес к точным решениям уравнения Шредингера. С одной стороны, это связано с запросами вычислительной физики, где они служат тестовыми примерами. С другой, — с бурным развитием теоретико-групповых и алгебраических методов исследования. Сюда можно отнести, например, метод суперсимметрии [1], применение преобразования Дарбу [2] и метода факторизации [3], метод конечнозонных потенциалов [4]. В серии работ [5—8] динамическая симметрия ряда потенциалов изучалась с использованием аппарата углового момента. В результате удалось как более глубоко понять алгебраическую природу известных точно решаемых моделей [9—11], так и обнаружить новые (см. также [12, 13], где новые точные решения были найдены традиционным образом).

Излагаемый подход является еще одним новым методом отыскания точных решений. Он состоит в рассмотрении гамильтонианов, являющихся функциями генераторов соответствующей группы Ли, и использовании представления обобщенных когерентных состояний [14]. При этом гамильтониан становится дифференциальным оператором, в частности опе-

ратором Шредингера с эффективным потенциалом. Характерной особенностью метода является то, что он имеет прямой физический смысл, поскольку лежащие в его основе вспомогательные математические конструкции — групповые гамильтонианы — сами по себе описывают разнообразные физические системы — парамагнетики, псевдоспиновые системы типа модели взаимодействующих фермионов Липкина — Мешкова — Глика [15] и т. д.

Ранее нами был рассмотрен случай [16] спинового гамильтониана, отвечающего одноосному парамагнетику. В настоящей работе исследована ситуация, соответствующая одночастичной спиновой системе с гамильтонианом самого общего квадратично-линейного вида, описывающим (если говорить о приложениях к магнетизму) двухосный парамагнетик во внешнем магнитном поле. Такое обобщение осуществляется для спинового гамильтониана непосредственно, однако в координатной картине оно приводит к качественно новым результатам.

Все эффективные потенциалы оказываются периодическими, так что точные решения являются зонными. Это особенно интересно в связи с тем, что хотя задача о квантовомеханическом движении частицы в одномерном периодическом потенциальном поле часто встречается в различных разделах физики твердого тела, теории колебаний молекул, теории солитонов и т. д., точные решения (модель Кронига — Пенни, дираковская гребенка [10], конечнозонные потенциалы [4]) являются здесь редкостью, а модели с простыми явными выражениями для характеристик энергетических зон найдены совсем недавно [4, 12, 16].

По сравнению с потенциалами, отвечающими одноосной анизотропии, удалось найти существенно больше случаев с простыми явными решениями. Кроме того, новые потенциалы еще разнообразнее по форме в зависимости от значений входящих в них параметров. Так, они могут иметь одновременно четверной минимум и четверной максимум.

В энергетическом спектре при изменении параметров потенциалов происходит много интересных структурных превращений — спаривание зон, возникновение новых «спиновых» зон, увеличение числа точных решений.

Обнаруженные потенциалы выражаются через эллиптические функции. Из них за счет различных предельных переходов могут быть получены конечнозонный потенциал Ламе, который играет важную роль в теории солитонов [4], и целый ряд других известных ранее точно решаемых моделей (в том числе и не периодических, включая как локализованные, так и растущие на бесконечности потенциалы), уже нашедших широкие применения. Сюда можно отнести потенциалы Морса, Эккарта (причем несимметричный), Пешля — Теллера и спиновый потенциал одноосного парамагнетика. В этом смысле обнаруженные потенциалы являются их обобщениями, объединяющими в единую картину эти столь различные, казалось бы, случаи; отвечающие им волновые функции можно рассматривать как обобщения соответствующих спецфункций.

1. ПОТЕНЦИАЛЫ ДЛЯ ДВУХОСНЫХ ПАРАМАГНЕТИКОВ В ПОПЕРЕЧНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ НА ОСНОВЕ СПИНОВЫХ КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ

Гамильтониан спиновой системы, которая описывает двухосный парамагнетик в магнитном поле B , перпендикулярном осям анизотропии, может быть записан в безразмерных величинах следующим образом:

$$(1) \quad H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 + B S_x,$$

где S_i — оператор i -й проекции спина S ($i=x, y, z$), а $\alpha \geq 0$ и $\beta \geq 0$ — константы анизотропии. Легко видеть, что квадратичная часть гамильтониана соответствует наиболее общему виду спиновой квадратичной формы. Решение задачи на собственные значения такого гамильтониана

$$(2) \quad H|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle$$

приводит к дифференциальному уравнению второго порядка типа уравнения Шредингера с эффективным потенциалом, если (следуя [16]) перейти к представлению спиновых когерентных состояний.

Ограничимся окружностью единичного радиуса в плоскости комплексной переменной ζ , параметризующей (ненормированное) спиновое когерентное состояние [14, 17], т. е. положим $\zeta = e^{i\varphi}$. Тогда спиновые операторы сводятся к дифференциальным (ср. с [18]):

$$(3) \quad \begin{aligned} \tilde{S}_x &= S \cos \varphi - \sin \varphi \frac{d}{d\varphi}, & \tilde{S}_y &= S \sin \varphi + \cos \varphi \frac{d}{d\varphi}, \\ \tilde{S}_z &= -i \frac{d}{d\varphi}, \end{aligned}$$

а соответствующие волновые функции имеют вид

$$(4) \quad \Phi(\varphi) = \sum_{\sigma=-S}^S \frac{c_\sigma}{\sqrt{(S-\sigma)!(S+\sigma)!}} e^{i\sigma\varphi},$$

где c_σ — обычная спиновая функция S_z -представления.

После подстановки выражений (3) в оператор (1) и несложных преобразований уравнение (2) приобретает вид

$$(5) \quad \begin{aligned} (\alpha + \beta \cos^2 \varphi) \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \left[B \sin \varphi + \beta \left(S - \frac{1}{2} \right) \sin 2\varphi \right] \frac{d\Phi}{d\varphi} + \\ + (\varepsilon - B S \cos \varphi + \beta^2 S^2 \sin^2 \varphi + \beta S \cos^2 \varphi) \Phi = 0. \end{aligned}$$

Стремясь убрать первую производную и одновременно сделать постоянным коэффициент при второй производной, делаем замену переменных

$$(6) \quad \psi = \Phi(\varphi) (\alpha + \beta \cos^2 \varphi)^{-S/2} \exp \left[-\frac{B}{2\sqrt{\alpha\beta}} \arctg \left(\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \cos \varphi \right) \right],$$

$$(7) \quad x = \sqrt{\alpha + \beta} \int_0^\varphi \frac{d\varphi'}{\sqrt{\alpha + \beta \cos^2 \varphi'}} = F \left(\varphi, \sqrt{\frac{\beta}{\alpha + \beta}} \right),$$

где $F(\varphi, k)$ — эллиптический интеграл первого рода с модулем k . При этом уравнение (5) приводится к нормальному виду

$$(8) \quad (\alpha + \beta) \frac{d^2 \psi}{dx^2} + [\varepsilon - U(x)] \psi = 0.$$

Таким образом, приходим к стандартному уравнению Шредингера для волновой функции ψ в координатном представлении x , описывающему движение квазичастицы с квадратичным законом дисперсии (обратная эффективная масса $m^{-1} = 2(\alpha + \beta)$) в эффективном потенциальном поле

$$(9) \quad U(x) = \frac{[B^2/4 - \alpha\beta S(S+1)] \operatorname{sn}^2 x + (\alpha + \beta) B(S + 1/2) \operatorname{cn} x}{\alpha + \beta \operatorname{cn}^2 x},$$

построенном из эллиптических функций Якоби [19]: эллиптического синуса $\operatorname{sn} x = \sin \varphi$ и эллиптического косинуса $\operatorname{cn} x = \cos \varphi$. Потенциал является четной периодической функцией x с периодом $4K$, где $K = K(k)$ — полный эллиптический интеграл первого рода.

Следует заметить, что уравнение (8) с потенциалом (9) является обобщением уравнения Ламе. Это можно увидеть, вводя в уравнение вместо α и β модуль эллиптических функций. Будем, однако, употреблять пока запись (8), (9), которая более удобна с точки зрения приложений, т. к. параметры α и β имеют непосредственный физический смысл. Обсуждение предельных переходов к уже известным точно решаемым моделям содержится в разделе 4.

Спиновым состояниям отвечают решения уравнения (8) вида (6), удовлетворяющие на основании (6), (7) условиям

$$(10) \quad \psi(x + 4K) = (-1)^{2S} \psi(x).$$

Поскольку волновые функции (6) имеют согласно (4) не более $2S$ узлов, на основании осцилляционной теоремы для уравнений с периодическим потенциалом [20] можно заключить, что спиновые состояния отвечают номерам $n \leq 2S$. Так как группа симметрии спинового гамильтониана абелева (особый случай $B=0$ будет рассмотрен в разделе 3) и вырождения нет, то все уровни энергии спиновой системы являются $2S+1$ низшими уровнями энергии (анти)периодических состояний уравнения Шредингера (8).

Полученные решения допускают простую интерпретацию на языке зонной картины (ср. с [16]); они отвечают нулевому квазиимпульсу в случае целого S и $\pi/4K$ в случае полуцелого и отвечают чередующимся дну и потолку энергетических зон. Согласно общей теории [20] периодические решения описываются волновыми функциями с числом нулей $0, 2, 2, 4, 4, \dots$, а антипериодические — с $1, 1, 3, 3, \dots$.

2. СВОЙСТВА ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА И ПРОСТЫЕ ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ

При заданном S потенциал (9) является, по существу, двухпараметрическим, зависящим от B/α и β/α , тогда как потенциал, отвечающий одноосному парамагнетизму [16] в поперечном поле, был однопараметрическим. Причем наряду с явной зависимостью от β/α имеется и неявная — через

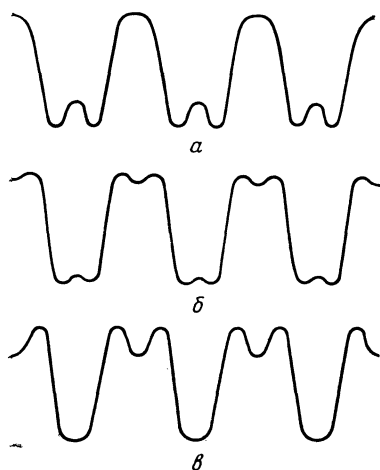


Рис. 1

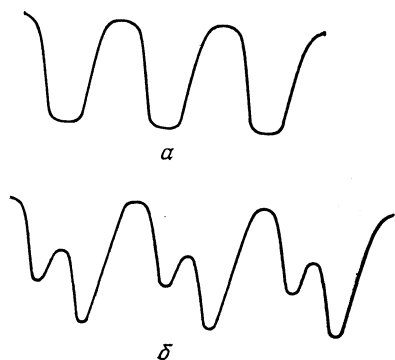


Рис. 2

модуль эллиптического интеграла $k = \sqrt{\beta/(\alpha+\beta)}$. Это приводит к большому разнообразию форм потенциала в зависимости от соотношения между B и характерными критическими значениями магнитного поля $B_{1,2} = \sqrt{S(S+1)(\alpha+\beta)^2 + (\alpha-\beta)^2/4 \mp (S+1/2)|\alpha-\beta|}$, а также между α и β . С ростом магнитного поля происходит переход от двойного минимума к простому через четверной; изменение же структуры максимума эффективного потенциала происходит в противоположном порядке — см. рис. 1а ($\alpha < \beta$, $B = B_1$), рис. 1б ($B = B_0$) и рис. 1в ($B = B_2$). Особенно интересно, что в случае $\alpha = \beta$ потенциал может иметь одновременно четверной максимум и четверной минимум при $B_0 = 2\alpha\sqrt{S(S+1)}$ (рис. 2а).

По отношению к уравнению Шредингера с потенциалом (9) спиновые решения можно считать точными (см. [16]). Для значений $S=0, 1/2, 1, 3/2, 2$ получаются простые явные формулы для уровней энергии и волновых функций спиновых состояний, а тем самым и соответствующих собственных значений и волновых функций уравнения (8).

Переходя к перечислению простых точных решений, условимся приводить для волновых функций (6) только множитель $\Phi(\varphi)$. В случае $S=0$ (который является тривиальным для спиновой системы, но потенциал при этом претерпевает изменения формы, характерные и для других S) $\epsilon_0=0$, $\Phi_0=1$. Таким образом, дно нулевой зоны периодического потенциала с $S=0$ остается фиксированным при всех деформациях потенциала.

При $S=1/2$ уровни энергии двух точных решений $\epsilon_{0,1} = (\alpha-\beta)/4 \mp B/2$ окаймляют первую щель между зонами, величина которой равна B . Соответствующие волновые функции определяются составляющими

$$\Phi_0 = \sin \frac{\varphi}{2}, \quad \Phi_1 = \cos \frac{\varphi}{2}.$$

Для $S=1$

$$\epsilon_{0,2} = \frac{\alpha-\beta}{2} \mp \sqrt{B^2 + \frac{(\alpha+\beta)^2}{4}},$$

$$\Phi_{0,2} = \cos \varphi + \frac{\epsilon_{0,2} - \alpha}{B}, \quad \epsilon_1 = \alpha - \beta, \quad \Phi_1 = \sin \varphi.$$

Любопытно, что энергия первого возбужденного состояния не зависит от B . В общем случае наибольшее число простых явных решений (при произвольных значениях параметров потенциалов) получается для $S=3/2$:

$$\varepsilon_{0,2} = \frac{5}{4}(\alpha - \beta) - \frac{B}{2} \mp \sqrt{\left(B + \frac{\alpha - \beta}{2}\right)^2 + \frac{3}{4}(\alpha + \beta)^2},$$

$$\Phi_{0,2} = \sin \frac{3\varphi}{2} + \frac{2}{B - \beta} \left(\varepsilon_{0,2} - \frac{9\alpha}{4} + \frac{3\beta}{4} \right) \sin \frac{\varphi}{2},$$

$$\varepsilon_{1,3} = \frac{5}{4}(\alpha - \beta) + \frac{B}{2} \mp \sqrt{\left(B - \frac{\alpha - \beta}{2}\right)^2 + \frac{3}{4}(\alpha + \beta)^2},$$

$$\Phi_{1,3} = \cos \frac{3\varphi}{2} + \frac{2}{B + \beta} \left(\varepsilon_{1,3} - \frac{9\alpha}{4} + \frac{3\beta}{4} \right) \cos \frac{\varphi}{2}.$$

При $S=2$ в общем случае (о других возможностях см. ниже) простые точные решения получаются для первого и третьего возбужденных состояний:

$$\varepsilon_{1,3} = \frac{5}{2}(\alpha - \beta) \mp \sqrt{B^2 + \frac{9}{4}(\alpha + \beta)^2},$$

$$\Phi_{1,3} = \sin 2\varphi - \frac{2}{B} \left[\frac{3}{2}(\alpha + \beta) \pm \sqrt{B^2 + \frac{9}{4}(\alpha + \beta)^2} \right] \sin \varphi.$$

Рассмотрим теперь особую область значений параметров, отвечающую повышению симметрии в системе. При этом энергетический спектр и форма потенциала обладают рядом интересных свойств, а с другой стороны, существенно возрастает число простых явных решений.

3. СВОЙСТВА СИММЕТРИИ И ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ

В общем случае группа симметрии гамильтониана (1) включает (помимо единичного элемента) поворот на угол π вокруг оси S_x и является абелевой, так что спиновые уровни энергии не вырождены. Изменение знака магнитного поля B в гамильтониане (1) приводит к эквивалентному гамильтониану, имеющему тот же энергетический спектр. В координатном описании этому преобразованию отвечает сдвиг начала координат на полпериода $2K$. Аналогично этому замена $\alpha \leftrightarrow \beta$ в гамильтониане (1) приводит с учетом отмеченного выше свойства к эквивалентному гамильтониану противоположного знака, так что спиновый спектр при такой замене инвертирует относительно нулевого значения.

Если $\alpha = \beta$, то уровни энергии входят в спектр парами (ε и $-\varepsilon$). В частности, в случае целого спина при любом B есть уровень $\varepsilon = 0$. Так, для $S=2$ и четных состояний (нечетные были найдены в разделе 2) имеем (для простоты до конца раздела считаем $\alpha = \beta = 1$):

$$\varepsilon_{0,4} = \mp 2\sqrt{B^2 + 3}, \quad \Phi_{0,4} = \cos 2\varphi + \frac{8B}{\varepsilon + 6} \cos \varphi + \frac{3(\varepsilon - 2)}{\varepsilon + 6},$$

$$\varepsilon_2=0, \quad \Phi_2 = \cos 2\varphi - \frac{4}{B} \cos \varphi - 1.$$

Если $S=3$, то

$$\varepsilon_{0;2} = -\varepsilon_{6;4} = -\sqrt{5B^2 + 33 \pm 4\sqrt{B^4 + 6B^2 + 54}},$$

$$\varepsilon_{1;5} = \mp 2\sqrt{B^2 + 15}, \quad \varepsilon_3 = 0.$$

Выражения для волновых функций при $S \geq 3$ мы не приводим из-за их громоздкости.

Для $S=4$ ненулевые уровни записываем компактно в форме

$$\varepsilon_{\text{четн}} = \mp \sqrt{10B^2 + 118 \pm 6\sqrt{B^4 - 6B^2 + 225}},$$

$$\varepsilon_{\text{неч}} = \mp \sqrt{5B^2 + 113 \pm 4\sqrt{B^4 + 38B^2 + 550}}.$$

Если $S=5$, аналогичный результат для нечетных состояний следующий:

$$\varepsilon = \mp \sqrt{10B^2 + 318 \pm \sqrt{6B^4 + 38B^2 + 1225}}.$$

Пусть теперь $B=0$. В этом предельном случае появляется новый элемент симметрии: гамильтониан (1) при любых α и β становится инвариантным относительно поворотов на угол π не только вокруг оси S_x , но и S_y (S_z). Если спин полуцелый, то такие преобразования антикоммутируют друг с другом, что означает вырождение уровней энергии (в случае целого спина группа симметрии остается абелевой и вырождение не возникает).

В результате для $\alpha=\beta$ и $B=0$ удастся найти явные выражения для характеристик состояний еще более высоких значений S :

$$S=5/2, \quad \varepsilon_{0;1} = -\varepsilon_{4;5} = -2\sqrt{7}, \quad \varepsilon_{2;3} = 0,$$

$$S=7/2, \quad \varepsilon_{0;1} = -\varepsilon_{6;7} = -\sqrt{63 + 12\sqrt{21}},$$

$$\varepsilon_{2;3} = -\varepsilon_{4;5} = -\sqrt{63 - 12\sqrt{21}},$$

$$S=9/2, \quad \varepsilon_{0;1} = -\varepsilon_{8;9} = -\sqrt{198 + 6\sqrt{561}},$$

$$\varepsilon_{2;3} = -\varepsilon_{6;7} = -\sqrt{198 - 6\sqrt{561}}, \quad \varepsilon_{4;5} = 0.$$

Формулу для $\Phi(\varphi)$ приведем в простейшем случае $S=5/2$ для основного состояния: $\Phi_0 = \sin \frac{5\varphi}{2} - \frac{1}{3} (11 + 4\sqrt{7}) \sin \frac{3\varphi}{2} - 2(5 + 2\sqrt{7}) \sin \frac{\varphi}{2}$.

Говоря о свойствах симметрии потенциала $U(x)$, укажем, что при $B=0$ происходит уменьшение периода потенциала вдвое и соответственно удваивается период в пространстве квазиимпульсов. В результате происходит попарное слияние зон с исчезновением всех нечетных щелей. При этом для целых S спиновые уровни энергии соответствуют краям всех слившихся зон. К тому же система обладает в этом случае интересным свойством конечнотонности (см. раздел 4). Если же S — полуцелое, то уровни энергии, отвечающие значениям квазиимпульса $\pi/4K$ и окаймляющие не-

четные щели, оказываются вырожденными (независимо от того, являются они спиновыми или нет).

Наоборот, при $B \neq 0$ период удваивается, возникает сверхрешеточный эффект расщепления зон. Такие превращения зон можно назвать «магнитными» структурными переходами.

С помощью численных методов (точные решения при этом служили тестовыми примерами) установлены также следующие особенности надспиновых зон. Если параметр S изменяется непрерывным образом, то при каждом целом значении S исчезают четные надспиновые щели, а при каждом полуцелом S — нечетные. Это спаривание зон сопровождается обменом четностью между уровнями энергии, которые обрамляют захлопывающиеся щели, а также превращением очередной надспиновой зоны в спиновую и появлением точных решений. Таким образом, мы имеем дело с периодическими «спиновыми» структурными переходами. В отличие от «магнитных» они не вызваны какой-либо явной симметрией потенциала и касаются только надспиновых зон. Представляют интерес строгое математическое доказательство и выявление соответствующей скрытой симметрии. Можно сказать, что в случае целых S спаривание зон является следствием конечноточности: при $B \neq 0$ вследствие сверхрешеточного эффекта все нечетные щели раскрываются, но четные надспиновые щели остаются закрытыми. При полуцелых S сверхрешеточный эффект проявляется только в спиновых зонах, а надспиновые зоны остаются спаренными.

Заметим, что наряду с двумя критическими значениями параметра $B_{1,2}$ (см. раздел 2) существует еще одно характерное промежуточное значение $B_0 = 2\sqrt{\alpha\beta S(S+1)}$, при котором потенциал становится антипериодическим: $U(x+2K) = -U(x)$. Возникает полная симметрия барьера и ямы (если $\alpha = \beta$, то происходит слияние всех трех опорных точек B).

4. КОНЕЧНОЗОННЫЙ И ДРУГИЕ ПРЕДЕЛЬНЫЕ СЛУЧАИ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ. АНАЛОГИ НА ОСНОВЕ $SU(1,1)$

Одним из интересных свойств обнаруженных в настоящей работе потенциалов является то, что они содержат как предельные случаи ряд известных широко используемых в физических приложениях точно решаемых моделей, являясь их обобщением. Для удобства разделим уравнение (8) на $\alpha + \beta$, а в потенциале $V = U/(\alpha + \beta)$ коэффициенты выразим через модули эллиптических функций k и $k' = \sqrt{1 - k^2}$. Тогда

$$(11) \quad V = \left[\frac{\mu^2}{4} - k^2 k'^2 S(S+1) \right] \frac{\operatorname{sn}^2 x}{\operatorname{dn}^2 x} + \mu \left(S + \frac{1}{2} \right) \frac{\operatorname{cn} x}{\operatorname{dn}^2 x},$$

$$\mu = B/(\alpha + \beta).$$

Соответствующий спиновый гамильтониан $H = k'^2 S_z^2 - k^2 S_y^2 + \mu S_x$.

Мы ограничимся рассмотрением трансформаций потенциала и спектра, опуская для краткости вопрос о поведении волновых функций.

Из свойств эллиптических функций [19] вытекает, что при $k=0$ потенциал переходит в $V = (\mu^2/4) \sin^2 x + \mu(S + 1/2) \cos x$, а при $k=1$ (и $\mu \rightarrow$

$\rightarrow -\mu$) — в $V = (\mu^2/4) \operatorname{sh}^2 x - \mu(S + 1/2) \operatorname{ch} x$, т. е. потенциалы, рассматривавшиеся в [16, 12].

Сделаем теперь замену переменной согласно $x = u - K$ и произведем перенормировку магнитного поля $B = b(\alpha + \beta)k'$. Тогда потенциал (11) становится равным

$$(12) \quad V = [b^2/4 - k^2 S(S+1)] \operatorname{cn}^2 u + b(S + 1/2) \operatorname{sn} u \operatorname{dn} u,$$

$$\text{а } H = k'^2 S_z^2 - k^2 S_y^2 + b k' S_x.$$

Эта форма записи удобна тем, что из нее непосредственно получается уравнение Ламе при нулевом магнитном поле ($b=0$). Если S — целое, потенциал Ламе обладает важным свойством конечности [4, 21]: остается только S спиновых щелей, а более высокие щели исчезают вообще. Такой потенциал отвечает некоторому частному случаю периодических решений уравнения Кортевега — де Фриза. Например, $S=1$ соответствует однолакунный потенциал Ламе, не меняющий своего вида при эволюции (аналог односолитонного решения) [13].

Если $k=0$, из (12) вновь получается (при произвольном b) периодический потенциал $V = (b^2/4) \cos^2 u + b(S + 1/2) \sin u$. Если же $k=1$, то приходим к обобщенному потенциалу Эккарта [1]

$$V = \frac{b^2/4 - S(S+1)}{\operatorname{ch}^2 u} + \frac{b(S + 1/2) \operatorname{sh} u}{\operatorname{ch}^2 u}.$$

При этом $H = -S_y^2$, а дискретные уровни энергии $\epsilon_n = -(S-n)^2$ ($n_{\max} = S-1$ для целого S и $n_{\max} = S - 1/2$ для полуцелого).

Всюду выше x считалось вещественным. Замена же $x = i\eta$ приводит к потенциалу, аналогичному (11), с той лишь разницей, что модули k, k' переходят друг в друга. Знак и нумерация спиновых уровней энергии заменяются на обратные (см. раздел 3).

Рассмотренные потенциалы были связаны с представлениями $SU(2)$ -алгебры. Аналогичным образом можно построить потенциалы на основе $SU(1, 1)$ -алгебры. Если исходить из генераторов K_0, K_1, K_2 ($K_0^2 - K_1^2 - K_2^2 = q(q-1)$, q — групповой индекс) в представлении соответствующих обобщенных когерентных состояний [14] (ср. с разделом 3), то можно показать, что гамильтониану

$$H = k'^2 K_0^2 + k^2 K_1^2 + \lambda k k' K_2$$

отвечает эффективный потенциал

$$(13) \quad V = \frac{q(q-1) + \lambda^2/4}{\operatorname{sn}^2 \eta} - \frac{\lambda(q - 1/2) \operatorname{cn} \eta}{\operatorname{sn}^2 \eta} - k^2 \left[\frac{\lambda^2}{4} + q(q-1) \right].$$

В предельном случае $k=0$ он переходит в обобщенный потенциал Пешля — Теллера [1]

$$V = \frac{q(q-1) + \lambda^2/4}{\sin^2 \eta} - \frac{\lambda(q - 1/2) \cos \eta}{\sin^2 \eta}$$

а при $k=1$ в

$$V = \frac{q(q-1) + \lambda^2/4}{\operatorname{sh}^2 \eta} - \frac{\lambda(q - 1/2) \operatorname{ch} \eta}{\operatorname{sh}^2 \eta}.$$

Поскольку здесь теперь $H=K_1^2$, ясно, что предельный переход совершается в состоянии сплошного спектра.

Сделаем несколько замечаний по поводу спектров двух различных групповых гамильтонианов — $SU(2)$ и $SU(1,1)$ — в простейшем случае, когда $B=0$. Если $q=S+1$ — целое, то при этом получается уравнение Ламе с конечнозонным потенциалом, причем низколежащие уровни энергии (определяющие положение щелей) являются по своему происхождению спиновыми, $SU(1,1)$ -мультиплету же принадлежат надспиновые (двукратно вырожденные в соответствии с исчезновением запрещенных зон). Таким образом, две существенно различные совокупности уровней энергии одного и того же уравнения с периодическими граничными условиями описываются двумя различными групповыми гамильтонианами.

Укажем еще, что подобно тому, как это было сделано для потенциалов спиновой природы, замена $\eta=i\xi$ приводит к потенциалу $SU(1,1)$ -типа, отличающемуся от (13) заменой $k \leftrightarrow k'$.

Итак, если охватить полученные результаты единым образом, используя комплексную x -плоскость, получается следующее. Вещественная и мнимая оси отвечают спиновым эффективным потенциалам, причем в каждом из этих вариантов содержатся как предельные случаи и потенциальная яма, и периодический потенциал, рассмотренные в [12, 16] (если отправляться от одноосного парамагнетика, то вдоль вещественной оси имеем только потенциальную яму, а чисто мнимой — периодический потенциал). Кроме того, получается также и обобщенный потенциал Эккарта. Напомним также, что в пределе малых значений магнитного поля спиновый потенциал одноосного парамагнетика превращается в потенциал Морса (точнее, в суперпозицию двух удаленных ям Морса [16]). Периодическим же потенциалам, связанным с представлениями $SU(1,1)$ -алгебры, отвечает изменение x вдоль прямых, отстоящих от вещественной или мнимой оси на K или K' , соответственно).

Отметим, что иной алгебраический подход на основе представлений $SU(2)$ и $SU(1,1)$, позволивший описать свойства потенциалов Морса и Эккарта, был развит в [7] с использованием представления Швингера. Связь уравнения Ламе со спиновым гамильтонианом обсуждалась в [6, 22, 23]. Во всех этих случаях групповой гамильтониан содержал лишь слагаемые, квадратичные по генераторам группы, что означает с физической точки зрения учет только анизотропии (если речь идет о парамагнетике). Включение же магнитного поля, описываемого линейным членом, и использование обобщенных когерентных состояний позволили значительно увеличить число точных решений и получить эффективные потенциалы с гораздо более разнообразными свойствами.

5. ОБОБЩЕНИЯ. РАСШИРЕНИЕ ЧИСЛА ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ И ЭФФЕКТИВНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Отметим, что полученные результаты обобщаются на случай двухосного парамагнетика в произвольно направленном магнитном поле. В частности, если магнитное поле лежит в плоскости, проходящей через одну из осей анизотропии, то спин-гамильтониан будет иметь вид

$$(14) \quad H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 + B S_x + C S_y.$$

Повторяя шаг за шагом рассуждения раздела 1, приходим к аналогичным результатам. Эффективный потенциал в уравнении Шредингера (8)

$$(15) \quad U(x) = [(B \operatorname{sn} x - C \operatorname{cn} x)^2 / 4 - \alpha \beta S(S+1) \operatorname{sn}^2 x + (\alpha + \beta) B(S + 1/2) \operatorname{cn} x + \alpha(S + 1/2) C \operatorname{sn} x] (\alpha + \beta \operatorname{cn}^2 x)^{-1}$$

с добавлением нового параметра C становится еще более гибким, изобилуя несимметричными профилями, один из которых приведен на рис. 2б.

Волновые функции стационарных состояний $\psi(x)$ связаны с составляющими представления спиновых когерентных состояний Φ формулой

$$(16) \quad \psi_n(x) = \Phi_n \cdot \left(\frac{\sqrt{\alpha - \beta} - \sqrt{\beta} \operatorname{sn} x}{\sqrt{\alpha + \beta} + \sqrt{\beta} \operatorname{sn} x} \right)^{C/4\sqrt{\beta}(\alpha + \beta)} \times \\ \times \frac{\exp \left\{ -\frac{B}{2\sqrt{\alpha\beta}} \operatorname{arctg} \left(\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \operatorname{cn} x \right) \right\}}{(\alpha + \beta \operatorname{cn}^2 x)^{S/2}}.$$

Сохраняется все сказанное относительно соответствия спиновых и зонных решений и получения точных решений. Однако уменьшается количество тех из них, для которых можно получить простые явные аналитические выражения для уровней энергии.

При $S=0$ единственный спиновый уровень энергии, определяющий дно основной зоны, остается нулевым $\varepsilon_0=0$, а в соответствующей волновой функции (16) $\Phi_0=1$. При $S=1/2$ уровни энергии основного и первого воз-

бужденного состояний $\varepsilon_{0,1} = \frac{\alpha - \beta}{4} \mp \frac{\sqrt{B^2 + C^2}}{2}$ окаймляют первую щель в зонном спектре потенциала (15), а

$$\Phi_0 = \sin \frac{\varphi - \varphi_0}{2}, \quad \Phi_1 = \cos \frac{\varphi - \varphi_0}{2}, \quad \varphi_0 = \operatorname{arctg} \frac{C}{B}.$$

Различные предельные переходы для потенциала (15) могут быть рассмотрены аналогично тому, как это было сделано в предыдущем разделе. В частности, отсюда можно получить несимметричные двухпараметрические (при фиксированном S) потенциалы, обнаруженные в [16].

Аналогичным образом можно рассмотреть спиновый квадратично-линейный гамильтониан общего вида

$$H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 + B S_x + C S_y + D S_z.$$

Ему соответствует комплексный потенциал.

Представляю интерес дальнейшие обобщения результатов настоящей работы и [16] на случай неквадратичных по генераторам гамильтонианов, более сложных алгебр Ли, многочастичных систем и т. п.

Авторы выражают благодарность В. М. Цукернику за интерес к работе и полезные замечания.

Литература

- [1] Генденштейн Л. Э. // Письма в ЖЭТФ. Т. 38. № 6. С. 299–302. Андрианов А. А., Борисов Н. В., Иоффе М. В. // ТМФ. 1984. Т. 61. № 2. С. 183–198.
- [2] Zheng W. M. // J. Phys. A. 1983. V. 16A. P. 43–47; J. Math. Phys. 1984. V. 25. № 1. P. 88–90.
- [3] Mielnik B. // J. Math. Phys. 1984. V. 25. № 12. P. 3387–3389.
- [4] Захаров В. Е., Мананков С. В., Новиков С. П., Питаевский Л. П. Теория солитонов. М.: Наука, 1980.
- [5] Alhassid Y., Iachello F., Gürsey F. // Chem. Phys. Lett. 1983. V. 99. № 1. P. 27–30.
- [6] Alhassid Y. // Chem. Phys. Lett. 1984. V. 108. № 1. P. 79–82.
- [7] Alhassid Y., Iachello F., Gürsey F. // Ann. Phys. 1983. V. 148. № 2. P. 346–380.
- [8] Alhassid Y., Engel J., Wu J. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. № 1. P. 17–20.
- [9] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
- [10] Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974.
- [11] Малкин И. А., Манько В. И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. М.: Наука, 1979, гл. 1.
- [12] Razavy M. // Amer. J. Phys. 1980. V. 48. № 4. P. 285–288; Phys. Lett. 1981. V. 82A. № 1. P. 7–9.
- [13] Ginocchio J. // Ann. Phys. 1984. V. 152. P. 203–219; 1985. V. 159. P. 467–480.
- [14] Переломов А. М. // УФН. 1977. Т. 123. № 1. С. 23–55.
- [15] Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. Т. 2. М.: Мир, 1984.
- [16] Заславский О. Б., Ульянов В. В. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 11. С. 1724–1733.
- [17] Radcliffe J. M. // J. Phys. A. 1971. V. 4A. № 3. P. 313–323.
- [18] Наймарк М. А. Линейные представления группы Лоренца. М.: Физматгиз, 1958.
- [19] Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, 1971, § 8.1.
- [20] Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1976.
- [21] Бейтмен Э., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т. 3. М.: Наука, 1967. С. 120.
- [22] Миллер У. Симметрия и разделение переменных. М.: Мир, 1981.
- [23] Patera J., Winternitz P. // J. Math. Phys. 1973. V. 14. P. 1130–1139.

Харьковский государственный
университет

Поступила в редакцию
5.XII.1985 г.

PERIODIC EFFECTIVE POTENTIALS FOR SPIN SYSTEMS AND NEW EXACT SOLUTIONS OF ONE-DIMENSIONAL SCHRÖDINGER EQUATION FOR ENERGY ZONES

Zaslavsky O. B., Ulianov V. V.

Using the technique developed in the previous paper by the authors and based on the representation of generalized coherent states, new effective periodic potential fields are found which describe rigorously stationary states of (pseudo)spin systems of the type of two-axis paramagnet in a magnetic field. The potentials change considerably depending on several parameters, in their profiles some peculiar shapes abound, of the type of double wells, two-hump barriers, quartic minima or maxima, and interesting phenomena take place in the zones (finite-zoneness, pairing of zones, etc.). It is shown that spin systems are connected with (anti)coherent states with extremal energy levels in $2s+1$ lower zones (s being the spin). On the basis of the spin-coordinate correspondence obtained, new classes of exact solutions of the Schrödinger equation are found for the energy zones with simple explicit expressions for energy levels and wave functions at $s=0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2, 4, 9/2, 5$. The potentials are expressed in terms of elliptic functions and include, as particular cases, the finite-zone Lamé – Eins potential, Eckart and Morse potentials. Effective potentials for the Hamiltonians of the $SU(1,1)$ group are also constructed.

Spin systems, spin coherent states and quasi-exactly solvable models

V. V. Ulyanov¹ and O. B. Zaslavskii²

*Department of Physics, Kharkov State University, Svobody Sq.4, Kharkov
310077, Ukraine*

E-mail addresses: ¹vladimir.v.ulyanov@univer.kharkov.ua

²aptm@kharkov.ua

Spin coherent states play a crucial role in defining QESM (quasi-exactly solvable models) establishing a strict correspondence between energy spectra of spin systems and low-lying quantum states for a particle moving in a potential field of a certain form. Spin coherent states are also used for finding the Wigner-Kirkwood expansion and quantum corrections to energy quantization rules. The closed equation which governs dynamics of a quantum system is obtained in the spin coherent representation directly for observable quantities.

Spin coherent states play a crucial role in defining QESM (quasi-exactly solvable models) establishing a strict correspondence between energy spectra of spin systems and low-lying quantum states for a particle moving in a potential field of a certain form. Spin coherent states are also used for finding the Wigner-Kirkwood expansion and quantum corrections to energy quantization rules. The closed equation which governs dynamics of a quantum system is obtained in the spin coherent representation directly for observable quantities.

In this paper we review three somewhat unusual applications of spin coherent states: 1) quasi-exactly-solvable models (QESM) and effective potential description of spin systems; 2) dynamics of quantum spin systems in terms of *observable* quantities; 3) Wigner-Kirkwood expansion and energy quantization rules (analogue of the Bohr-Sommerfeld rules) with quantum corrections, derivation not using the path integral approach; the crucial point here that the series for quantization rules turned out to be the direct consequence of the Wigner-

Kirkwood expansion, so the present approach establishes the connection between two quite different expansions. It is essential that all three points under discussion which look so different are based on the possibility to represent the spin operators as the differential ones.

Let us consider the standard expression for a spin coherent (not normalized) state:

$$|\xi\rangle = \exp(\xi S_-)|S\rangle = \sum_{\sigma=-S}^S \sqrt{\frac{(2S)!}{(S-\sigma)!(S+\sigma)!}} \xi^{S-\sigma} |\sigma\rangle \quad (1)$$

where $|\sigma\rangle$ denotes the state with the S_z projection equal to σ , $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$. Then using the commutation relation for different projections of spin operators we obtain that for any function f of spin operators S_i :

$$\langle \xi | S_i f | \xi \rangle = \ddot{S}_i f \quad (2)$$

where $f = \langle \xi | f | \xi \rangle$ and

$$\ddot{S}_+ = \frac{\partial}{\partial \xi^*}, \quad \ddot{S}_- = -\xi^{*2} \frac{\partial}{\partial \xi^*}, \quad \ddot{S}_z = -\xi^* \frac{\partial}{\partial \xi^*} \quad (3)$$

Another version of the representation of spin operators in terms of differential ones arises if one uses normalized spin coherent states $|\vec{n}\rangle = (1 + \xi\xi^*)^{-S} |\xi\rangle$. Then, similarly to (2) we have

$$\langle \vec{n} | S_i f | \vec{n} \rangle = \hat{S}_i f \quad (4)$$

where now $f = \langle \vec{n} | f | \vec{n} \rangle$. Here \vec{n} is the unit vector whose direction is parametrized by two angles or a complex number ξ according to $\xi = \tan \frac{\theta}{2} \exp(i\phi)$. The explicit expressions for \hat{S}_i are the following:

$$\hat{S}_x = \frac{S(\xi + \xi^*)}{1 + \xi\xi^*} + \tilde{S}_x, \quad \hat{S}_y = \frac{S(\xi - \xi^*)}{i(1 + \xi\xi^*)} + \tilde{S}_y, \quad \hat{S}_z = \frac{S(1 - \xi\xi^*)}{(1 + \xi\xi^*)} + \ddot{S}_z \quad (5)$$

These expressions can be rewritten in the form

$$\vec{S} = S\vec{n} + \frac{1}{2}(\hat{a} - i\hat{b}), \quad \hat{a} = -\vec{n} \times \hat{b}, \quad \hat{b} = \vec{n} \times \nabla, \quad \nabla = \frac{\partial}{\partial \vec{n}} \quad (6)$$

The formulas for \ddot{S}_i and \hat{S}_i play the key role in what follows.

I. QESM AND SPIN COHERENT STATES

Quasi-exactly solvable models is an rather unusual object in quantum mechanics which occupies a position intermediate between exactly solvable models and models which cannot be solved at all. At present, there are several reviews on QESM [1], [2], [3], [4], [5] made from different viewpoints where a reader can find references to original papers and history of discovering QESM. In the present paper we outline briefly aspects of QESM connected with their physical realization.

Usually, the typical situation in quantum mechanics with exact solutions of the Schrödinger equation is the following. (1) The expressions for wave functions and energy levels can be found for a whole spectrum; (2) a hidden underlying algebraic structure which makes it possible to find exact solutions has the auxiliary character which in itself has no direct physical meaning; (3) the possibility to describe some object by a potential field which admits exact solutions is determined by comparison with an experiment but not by inner structure of the problem. In contrary, for QESM (1) only the part of the spectrum can be found explicitly or implicitly from the algebraic equation of finite degree; (2)-(3) the underlying algebraic structure (spin Hamiltonian) has direct physical meaning, so potential description of spin systems arises because of just the spin structure itself in a rigorous sense; that leads to the notion of an essentially new type of quasi-particle which can be called "spinon".

Let us consider the spin Hamiltonian

$$H = a_{ij}S_iS_j + b_iS_i \quad (7)$$

The representation for spin operators in terms of differential ones (3) enables one to obtain for the eigenvalue problem the second order differential equation which after a simple substitution and, in general, the change of variables, leads to the standard Schrödinger equation with some potential. Below we discuss several examples. Let, first

$$H = -S_z^2 - BS_x \quad (8)$$

that describes an uniaxial paramagnet in an transverse magnetic field. Then in the corresponding Schrödinger equation the potential $U = B^2/4 \sinh^2 x - B(S + \frac{1}{2}) \cosh x$, the wave function $\Psi = \Phi \exp[-(\frac{B}{2} \cosh x)]$ where $\Phi = \sum_{\sigma=-S}^{\sigma=S} a_{\sigma} e^{\sigma x}$ with some coefficients a_{σ} . It follows from the form of the wave function that it decays rapidly at infinity and, therefore, describes bound states. On the basis of the oscillation theorem it follows from the form of the wave function that the spin energy levels coincide with the initial $2S + 1$ energy levels of the particle ("spinon") moving in the potential under discussion. The higher levels have nothing to do with the spin system in question. The found effective potential undergoes a curious transformation as the magnetic field changes. For $B > B_0 = 2S + 1$ it has the form of a single well, for $B < B_0$ it changes into a double well, for $B = B_0$ it takes the form of a well with a fourfold minimum.

Near the critical magnetic field $B = B_0$ the potential can be approximated by a power expansion. and represents, in fact, a quartic anharmonic oscillator. Using properties of such a system, one can show that for the paramagnet at hand the magnetic susceptibility has a maximum at $B = B_0[1 - \gamma(S + \frac{1}{2})^{-2/3}]$ where $\gamma \sim 1$. This maximum does not disappear in the limit $S \rightarrow \infty$ and in this sense has a pure quantum origin. Another application of the effective potential method consists in the possibility to calculate tunnelling rates for $B < B_0$ using well known methods of quantum mechanics (WKB, instantons, etc.). Even much more important is that the effective potential description gives clear qualitative understanding of what the phenomenon of spin tunnelling is and in what sense spin, which is a quantum object of pure discrete nature, can tunnel through classically forbidden region.

It turns out that in general the effective potential describing spin systems is periodic, spin levels corresponding to edges of energy bands. For instance, for $H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 + BS_x$ the potential U is expressed in terms of elliptic functions, the condition which select spin levels reads $\Psi(x + 4K) = (-1)^{2S} \Psi(x)$ where $K = K(k)$ is the complete elliptic integral of the first kind, $k = \sqrt{\beta/(\alpha + \beta)}$.

Sometimes the infinite Hilbert space of a quantum system can be divided to a set of finite subspaces with respect to the value of some integral of motion R . Then in each subspace

one can introduce its own effective potential. In this sense for the Dicke spin-boson model with $H = \omega a^\dagger a + \varepsilon S_z - g(a^\dagger S_- + S_+ a)$ we have $U = r^6 - Ar^4 + Br^2 + Cr^{-2}$ (we do not give the values of constants for shortness). The similar potential with $C = 0$ corresponds to two interacting oscillators $H = \omega a^\dagger a + \Omega b^\dagger b + g(a^\dagger b^2 + ab^{\dagger 2})$. In general, QESM demonstrate a lot of nontrivial correspondences between spectra of quite different quantum systems.

II. DYNAMICS OF SPIN SYSTEMS

Consider the Heisenberg equation for an arbitrary operator $\hat{g}(\vec{S})$ in the case of a time-independent Hamiltonian H

$$\dot{\hat{g}} = (i/\hbar)(\hat{H}\hat{g} - \hat{g}\hat{H}) \quad (9)$$

and average it over a spin coherent state. Then, using relations (5), (6) we obtain

$$\dot{g} = (i/\hbar)\hat{K}g, \quad g = \langle \vec{n} | g | \vec{n} \rangle, \quad \hat{K} = H(\vec{S}) - c.c. \quad (10)$$

This is the closed equation for an arbitrary quantum system. In the classical limit it turns into the equation $\dot{g} = \{H_{cl}, g\}$ where $\{\dots\}$ denote the Poisson bracket which contains derivatives with respect to the component of a classical spin (magnetization) of the first order only. The equation of motion has the same form for any quantity and the only point where the distinction between different solution comes from is the initial condition: $g(t=0)$ should be specified as a function of \vec{n} (or ξ and ξ^*). As a matter of fact, variables which parametrize a spin coherent state play the role of quantum generalization of Lagrange (but not Euler) coordinates. It is remarkable that the equation under discussion is obtained directly in terms of averages, i.e. observable quantities, so the stages of finding the wave function and the subsequent averaging are avoided completely.

Consider the following example. Let the Hamiltonian have the form $H = -BS_x - DS_x^2$ and $D \ll B/S$. Then one can show that account for higher derivatives in the Schrödinger equation gives rise to a pure quantum modulation of a classical periodic dependence: $\langle S_+ \rangle = S \sin \theta \exp[(i(\phi - \omega t))][\cos \tau + i \sin \tau \cos \theta]^{2S-1}$, $\tau = Dt/\hbar$, $\omega = B/\hbar$.

III. QUASICLASSICAL APPROXIMATION FOR SPIN SYSTEMS

Spin is essentially quantum object having a discrete nature. On the other hand, in the classical limit a spin system is described by the classical Hamiltonian function in which the role of natural variables is played by two angles (for each spin), e.g. variables which change continuously. Therefore, if one is interested in constructing the analogue of the Wigner-Kirkwood expansion in powers of S^{-1} the following question immediately arises: how can these two circumstances be reconciled? The ideal tool to handle this problem is the apparatus of spin coherent states: (1) they ensure continuous representation of a spin; (2) they minimize the Heisenberg uncertainty relation, so they are "the most classical states" and in this sense are already adjusted for the description of the quasiclassical limit and finding quantum corrections; (3) they form complete (even overcomplete set of states). Using spin coherent states as a basis we can construct the expansion in question as the perturbation theory with respect to derivatives according to (6). In particular, the first correction for one-particle Hamiltonian $H = f(\vec{S})$ turns out to be $\delta F = \frac{1}{4}S^{-1} \sum_{k,l} \langle (\delta_{kl} - n_k n_l)(f_{,k,l} - T^{-1} f_{,k} f_{,l}) \rangle$ where δ_{kl} is the Kronecker delta, $f_{,k} = \frac{\partial f}{\partial n_k}$, angular brackets indicate averaging over the classical Gibbs distribution with the corresponding classical Hamiltonian function $f(S\vec{n})$, T is a temperature.

It is remarkable that, knowing the Wigner-Kirkwood series, one may recover from it the form of the energy quantization rules with quantum corrections without approximate solving the Schrödinger equation. For the "ordinary" quantum mechanics it was shown in [6] and is extended now directly to spin systems.

To summarize, spin coherent states not only establish link between quantum and classical spin systems - they even lead to such constructions which (like QESM) in themselves have nothing to do with spin!

The work of O. Z. is supported by ISF, grant # QSU080268.

References

- [1] M.A. Shifman, *International Journal of Modern Physics A* **4**, 3311 (1988)
- [2] V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii, *Physics Reports* **216**, 179 (1992).
- [3] A. G. Ushveridze, Quasi-exactly solvable models in quantum mechanics (Institute of Physics Publishing, Bristol, 1994).
- [4] A.V. Turbiner, Lie-Algebras and linear operators with invariant subspaces, *Contemporary Mathematics* **160**, 263 (1994).
- [5] A.V. Turbiner, 'Quasi-exactly solvable differential equations', In: "CRC Handbook of Lie group analysis of differential equations", vol. 3, Chapter 12. Ed. N.H. Ibragimov, CRC Press, Boca Raton, Florida, 1996, p. 329-364.
- [6] V.V. Ulyanov, *Integral methods in quantum mechanics*, (Vischa Shkola, Kharkov, 1982, in Russian).

PHYSICAL REVIEW B

CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS

1 SEPTEMBER 1999

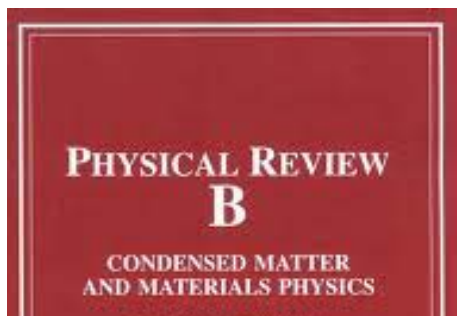
I

Published by
THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY
through the
American Institute of Physics

Volume 60

Third Series

Number 9



**Phys. Rev. B 60, 6212–6214
(1999)**

Tunneling series in terms of perturbation theory for quantum spin systems

Abstract

[V. V. Ulyanov](#) and [O. B. Zaslavskii](#)*

Department of Physics, Kharkov State University, Svobody Square
4, Kharkov 310077, Ukraine

Received 16 April 1999; published in the issue dated 1 September
1999

Considered is quantum tunneling in anisotropic spin systems in a magnetic field perpendicular to the anisotropy axis. In the domain of small field the problem of calculating tunneling splitting of energy levels is reduced to constructing the perturbation series with degeneracy, the order of degeneracy being proportional to a spin value. Partial summation of this series taking into account terms with small denominators is performed and the value of tunneling splitting is calculated with allowance for the first correction with respect to a magnetic field.

Tunneling series in terms of perturbation theory for quantum spin systems

V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii*

Department of Physics, Kharkov State University, Svobody Square 4, Kharkov 310077, Ukraine

(Received 16 April 1999)

Considered is quantum tunneling in anisotropic spin systems in a magnetic field perpendicular to the anisotropy axis. In the domain of small field the problem of calculating tunneling splitting of energy levels is reduced to constructing the perturbation series with degeneracy, the order of degeneracy being proportional to a spin value. Partial summation of this series taking into account terms with small denominators is performed and the value of tunneling splitting is calculated with allowance for the first correction with respect to a magnetic field. [S0163-1829(99)04530-0]

Tunneling splitting of energy levels and the appearance of gaps in the energy spectrum of a quantum system is connected with breaking the symmetry of an unperturbed system by perturbation removing degeneracy. Usually, this effect is realized in quantum mechanics in two typical situations. The first one consists in that the Hamiltonian can be represented in the form $H = H_0 + V$, where H_0 is the unperturbed Hamiltonian and V is perturbation, so correction to energy levels can be calculated with the help of some version of the perturbation theory. Another situation is tunneling splitting of energy levels for a particle moving in a symmetric double well due to tunneling penetration into a classically forbidden region. In that case the tunneling splitting can be found by means of one of the quasiclassical methods (WKB, instanton calculus, etc.). Although the physical reason—removing degeneracy—is the same in both cases, it is described in terms of essentially different languages, regions of applicability of which, generally speaking, do not match.

It turns out, however, that there exists a whole class of physically interesting systems for which both approaches can be combined—anisotropic spin systems whose Hamiltonian is a quadratic-linear combination of spin operators. Their energy spectrum admits rigorous description in terms of an effective potential:¹ energy levels of a spin system coincide with $2S + 1$ low-lying levels for a particle moving in a potential field of a certain form. If such a spin system is of the easy type, for a sufficiently small field the corresponding potential has the form of a double well typical of tunneling effects, so the energy splitting can be obtained, for example, with the help of instanton formulas,^{1,2} the accuracy of which grows as a magnetic field decreases and the spin value increases. On the other hand, in the domain of small fields the perturbation theory can be applied. Thus, for sufficiently small magnetic fields and $S \gg 1$, both approaches match.

The nontrivial peculiarity of the perturbation theory in such a situation consists in that the order of degeneracy is proportional to the spin value.³ As the quantity S plays the role of the inverse Planck constant \hbar , it turns out that the degree of degeneracy tends to infinity in the quasiclassical limit. In so doing, terms such as B^{2S} appear in the perturbation series which are nonanalytic with respect to S^{-1} in the limit $S \rightarrow \infty$, which in itself testifies that although calculations are carried out on the basis of perturbation theory, the effect in fact admits the tunnel interpretation.

In the leading order of perturbation theory the result of the calculation of tunneling splitting has been reported in Ref. 4 (without detailed derivation) and, independently in Ref. 1, in which a consistent derivation of the formulas for energy splitting was suggested. This derivation was not a direct application of standard formulas of the perturbation theory from textbooks and required careful singling out and summing of all such terms. In the present paper we perform the next step and calculate the first nonvanishing correction to the tunneling splitting for an arbitrary value of a spin. The approach developed in Ref. 1 and the present paper is of a systematic character that enables one to construct the series with respect to a magnetic field value including high-order corrections. In this sense the calculation of the tunneling rate is reduced to summing up the perturbation theory series with a given accuracy.

In recent years interest in the nature of quantum tunneling in spin systems of different nature has sharply increased. It concerns the crossover between quantum and thermal domains,⁵ tunneling in small ferromagnet particles,⁶ many-spin molecules,⁷ etc. Therefore, formulas for the tunneling splitting obtained below can be of interest not only from a viewpoint of general methods of quantum theory but for a description of concrete physical systems observable in experiments.

Let us consider the system described by the Hamiltonian

$$H = -S_z^2 - BS_x. \quad (1)$$

Here S_i is the operator of a corresponding spin component, and B is a magnetic field. Since the first term enters Eq. (1) with a negative sign, the system has an easy axis z . In the absence of a magnetic field all energy levels, except the one with $S_z = 0$ in the case of an integer S , are twofold degenerate. A magnetic field removes this degeneracy. The problem is to calculate the energy splitting due to quantum tunneling with the first correction in B taken into account when $B \rightarrow 0$.

Consider the Brillouin-Wigner perturbation series

$$E = \varepsilon_\sigma + \frac{V_{\sigma, \sigma-1}^2}{\alpha_{\sigma-1}} + \frac{V_{\sigma, \sigma+1}^2}{\alpha_{\sigma+1}} \dots, \quad (2)$$

where $\varepsilon_\sigma = -\sigma^2$ corresponds to the unperturbed level with a z projection of spin equal to σ , $\alpha_\sigma = E - \varepsilon_\sigma$, the perturbation

$V = -BS_x$; we took into account that diagonal matrix elements of perturbation are equal to zero. In order to determine ΔE_σ correctly, one needs to take into account explicitly the role of small denominators in terms of the perturbation series by performing a partial summation of Eq. (2). Following Ref. 1 we sketch this procedure below. Consider, for simplicity, the splitting for the ground energy level ΔE_0 . The leading terms f reads

$$f = \frac{(V_{S,S-1}V_{S-1,S-2}\cdots V_{-S+1,-S})^2}{[(E-\varepsilon_{S-1})(E-\varepsilon_{S-2})\cdots(E-\varepsilon_{-S+1})]^2}(E-\varepsilon_S)^{-1}. \quad (3)$$

If we introduce a sequence of points on a number axis from S to $-S$ corresponding to different values of σ , then this term corresponds to a single sequential transition from S to $-S$ and back. Now take into account that some elements of the number axis can be passed back and forward a few times (after a transition from S to $-S$ the system returns to the intermediate point σ , then to $-S$ again and so on, passing the intermediate values of σ). This suggests that additional factors appear in the perturbation series. Thus in the sum over terms which contain f as a common factor one should include higher orders of the perturbation. It is easy to guess that this leads to the following form of the last retained term in the perturbation series:

$$f \rightarrow \tilde{f} = f(1 + r + r^2 + \cdots) = f(1 - r)^{-1},$$

$$r = (E - \varepsilon_S)^{-1} \chi, \quad \chi = \frac{V_{-S,-S+1}V_{-S+1,-S}}{E - \varepsilon_{-S+1}} + \cdots \quad (4)$$

The factor χ has the same form as the initial perturbation series (2) that allows one to construct a simple equation with respect to E :

$$\left(E - \varepsilon_\sigma - \frac{V_{S,S-1}^2}{E - \varepsilon_{S-1}} - \frac{V_{S,S+1}^2}{E - \varepsilon_{S+1}} + \cdots \right)^2 = g_S^2, \quad (5)$$

$$g_S = \frac{V_{S,S-1}V_{S-1,S-2}\cdots V_{-S+1,-S}}{(E - \varepsilon_{S-1})(E - \varepsilon_{S-2})\cdots(E - \varepsilon_{-S+1})}.$$

Generalization to other levels is straightforward and the result reads

$$\left(E - \varepsilon_\sigma - \frac{V_{\sigma,\sigma-1}^2}{E - \varepsilon_{\sigma-1}} - \frac{V_{\sigma,\sigma+1}^2}{E - \varepsilon_{\sigma+1}} + \cdots \right)^2 = g_\sigma^2, \quad (6)$$

$$g_\sigma = \frac{\prod_{k=0}^{2\sigma-1} V_{\sigma-k,\sigma-k-1}}{\prod_{k=1}^{2\sigma-1} \alpha_{\sigma-k}}.$$

The differences of the signs correspond to the level splitting (the remaining terms coincide, making no contribution to the splitting). Taking advantage of the explicit form of the matrix elements $V_{\sigma,\sigma'}$ we get

$$\Delta^{(0)}E_\sigma = 2g_\sigma = 2\left(\frac{B}{2}\right)^{2\sigma} \frac{(\sigma+S)!}{(S-\sigma)!(2\sigma-1)!} \quad (7)$$

in accordance with^{4,1} where $\sigma = S - n$, and n is the number of the unperturbed level.

The first correction to Eq. (7) stems from three origins. First, the value of g_σ in Eq. (6) acquires the correction due to field dependence of levels E_σ . Second, the correction appears due to E_σ which enter denominators in terms containing V^2 in the left-hand side of Eq. (6). Third, the correction arises because of the next order terms in the perturbation series itself which change the structure of g_σ . Let us write down the total fractional correction as $\xi \equiv \Delta E_\sigma / \Delta E_\sigma^{(0)} \equiv \xi_1 + \xi_2 + \xi_3$ and calculate each term separately.

The first term $\xi_1 = \prod_{k=1}^{2\sigma-1} [(E^{(0)} - \varepsilon_{\sigma-k}) / (E - \varepsilon_{\sigma-k})]$. Substituting into this formula the explicit expression for unperturbed levels $E_\sigma^{(0)} = -\sigma^2$ and taking into account the second order correction to E , which can be easily found from the standard perturbation theory, we obtain ($n = S - \sigma$)

$$\xi_1 = -\frac{B^2[n^2 - 2Sn + S(2S+1)]}{(2S-2n)[(2S-2n)^2 - 1]} \sum_{k=1}^{2S-2n-1} k^{-1}. \quad (8)$$

The second type contribution to the correction can be found directly from the Brillouin-Wigner perturbation series by elementary methods:

$$\xi_2 = -\frac{B^2}{4} \left[\frac{(n+1)(2S-n)}{(2S-2n-1)^2} + \frac{n(2S-n+1)}{(2S-2n+1)^2} \right]. \quad (9)$$

The calculation of ξ_3 is the nontrivial and rather cumbersome part of the computations. This quantity is connected with the correction to the perturbation theory itself, which is to be now cut off at terms of the order B^{2S+2} . According to Ref. 1, a typical term of the perturbation theory series arises as follows. It is necessary to take the segment $[-\sigma, \sigma]$ and allow for all possible paths of the transition between these two points, provided that each intermediate point on each path is being passed two times (to and from). The main corrections to these terms arise if the transition from a given point to a next one contains one extra jump to and one from (delay and "marking time"). Summing up over all possible points—origins of extra jumps to and from—we obtain

$$\xi_3 = \sum_{k=2}^{2S-1} \frac{V_{\sigma-k,\sigma-k+1}^2}{\alpha_{\sigma-k}\alpha_{\sigma-k+1}}. \quad (10)$$

Summing up all three contributions we find, after direct but somewhat lengthy calculations, the final expression which proves to be surprisingly simple:

$$\xi = 1 - B^2\gamma, \quad \gamma = \frac{(2S+1)^2(\sigma+1)}{2(2\sigma-1)^2(2\sigma+1)^2}. \quad (11)$$

Thus, for an arbitrary energy gap (except the highest one in the case of semi-integer S) we get

$$\Delta E_n = \frac{(2S-n)!}{2^{2S-2n-1}n!(2S-2n-1)!^2} B^{2S-2n} \left[1 - \frac{(2S+1)^2(S-n+1)}{2(2S-2n-1)^2(2S-2n+1)^2} B^2 \right]. \quad (12)$$

This formula is supplemented for semi-integer S by the expression for the highest gap:

$$\Delta E_{S-1/2} = \left(S + \frac{1}{2} \right) B \left[1 - \frac{1}{16} \left(S + \frac{3}{2} \right) \left(S - \frac{1}{2} \right) B^2 \right]. \quad (13)$$

The obtained formulas, as was mentioned above, are valid when $B \rightarrow 0$. However, the presence of the correction term in Eqs. (12) and (13) aids in making the area of applicability of these formulas more precise. First of all, the correction gives a qualitative notion about the approximation: it is seen that without accounting for such a correction the result is overstated. Further, the quantitative role of the correction turns out to be twofold.

First, it enables us to estimate the accuracy of the first approximation. Let us restrict ourselves by remarks concerning the ground gap ($S > 1/2$),

$$\Delta E_0 = \frac{S^2}{2^{2S-3}(2S)!} B^{2S} \left[1 - \frac{(S+1)}{2(2S-1)^2} B^2 \right]. \quad (14)$$

It is seen from this formula that in the case $S \gg 1$, with the correction neglected, the fractional error is $B^2/8S$. That means that even for $B = \sqrt{S}$ the computation of the ground gap gives the error approximately 10% while in the case $B = 1$ it proves to be very small, being of the order $0.1/S$.

Second, the allowance for the correction essential increases the accuracy of computations. Thus, even for so large values of a magnetic field as \sqrt{S} can be thought of to be,

taking into account the correction enables one to make the fractional error one order smaller.

It is worth noting that while computing energy gaps numerically even for moderately large values of S one is led to take into account a very large number of digits that can be achieved only by modern computer computation systems. For example, in the case $B = 1$, $S = 10$ the gap has the order 10^{-20} while for $S = 50$ it is of the order 10^{-200} .

Either the main term or the correction in Eq. (14) is in agreement with the instanton approach¹ but for $S \gg 1$. Meanwhile, it is worth stressing that Eqs. (12) and (13) are applicable for all values of S and embrace all the gaps.

In the case of an easy-plane spin system, i.e., a system with a Hamiltonian $H = +S_z^2 - BS_x$, the energy spectrum differs from that of the easy-axis type by the interchange of the sign of energy. Therefore, formulas for gaps remain valid provided they are renumbered, so that the lowest gap becomes the highest and vice versa. As far as the effective potential is concerned, in this case we have the model of a periodic potential energy in which the energy levels of a spin system coincide with the corresponding edges of energy bands.¹

The elaborated approach describes quantum tunneling in terms of the perturbation theory and enables one, in principle, to construct the energy level splitting as a series with respect to B with any given accuracy.

The work of O.Z. was supported by International Science Education Program (ISEP), Grant No. QSU082068.

*Electronic address: aptm@kharkov.ua

¹V. V. Ulyanov and O. B. Zaslavskii, Phys. Rep. **216**, 179 (1992).

²M.ENZ and R. Schilling, J. Phys. C **19**, L711 (1996).

³I. Ya. Korenblit and E. F. Spender, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **75**, 1862 (1978) [Sov. Phys. JETP **48**, 937 (1978)].

⁴D. A. Garanin, J. Phys. A **24**, L61 (1991).

⁵E. M. Chudnovsky and D. A. Garanin, Phys. Rev. Lett. **79**, 4469 (1997).

⁶G.-H. Kim and D. S. Hwang, Phys. Rev. B **55**, 8918 (1997).

⁷A. K. Zvezdin, V. V. Dobrovitski, B. N. Harmon, and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **58**, R14 733 (1998).

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|--|----|
| Предисловие | 3 |
| Новые точные решения уравнения Шредингера с потенциалами спинового и солитонного происхождения // ФНТ. - 1997. - Т. 23, № 1. – С.110-119 (обзорная статья). – Соавт.: Заславский О.Б., Василевская Ю.В. | 4 |
| New exact solutions of the Schrödinger equation with potentials of spin and soliton origin// Low Temp. Phys. 23 (1), January 1997. P. 82-88. – Соавт.: Заславский О.Б., Василевская Ю.В.. | 16 |
| К теории низкотемпературных свойств спиновых систем с магнитной анизотропией // ФНТ. - 1997. - Т. 23, № 12. – С. 1289-1295. - Соавт.: Заславский О.Б., Василевская Ю.В. | 23 |
| On the theory of low-temperature properties of spin systems with magnetic anisotropy// Low Temp. Phys. 23 (12), December 1997. P. 968-972. - Соавт.: Заславский О.Б., Василевская Ю.В. | 30 |
| Низкотемпературные свойства одноосных парамагнетиков в наклонном магнитном поле // ФНТ. - 1998. - Т. 24, № 7. – С. 627-634. - Соавт.: Заславский О.Б., Василевская Ю.В. | 35 |
| Low-temperature properties of uniaxialparamagnets in a tilted magnetic field// Low Temp. Phys. 24 (7), July 1998. P. 473-478. - Соавт.: Заславский О.Б., Василевская Ю.В. | 43 |
| К теории низкотемпературной восприимчивости спиновых систем с магнитной анизотропией // ФНТ. - 1983. - Т. 9, № 5. – С. 511-519. - Соавт.: Заславский О.Б., Цукерник В.М. | 49 |
| Новые классы точных решений уравнения Шредингера и описание спиновых систем с помощью потенциальных полей // ЖЭТФ. - 1984. – Т. 87, № 5. - С. 1724-1733. – Соавт.: Заславский О.Б. | 59 |
| New classes of exact solutions of the Schrödinger equation and potential-field description of spin systems//Sov. Phys. JETP 60 (5), November 1984. P. 991-996. – Соавт.: Заславский О.Б. | 70 |
| Периодические эффективные потенциалы для спиновых систем и новые точные решения одномерного уравнения Шредингера для энергетических зон // ТМФ. - 1987. - Т. 71, № 2. - С. 260-271. - Соавт.: Заславский О.Б. | 76 |
| Spin systems, spin coherent states and quasi-exactly solvable models // Proc. of the XXII Int. Colloquium on Group Theor. Methods in Physics (Cambridge, MA: Int. Press). - 1998. – P.213-217 (обзорная статья). - Соавт.: Заславский О.Б.. | 89 |
| Tunneling series in terms of perturbation theory for quantum spin systems // Phys. Rev. B.-1999. - V. 60, N 9. - P. 6212-6214. – Соавт.: Заславский О.Б. | 96 |

Наукове видання

Володимир Володимирович Ульянов

ЗБІРКА ОГЛЯДІВ І СТАТЕЙ З КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ

(зі співавторами та без)

Частина друга

Російською і англійською мовами

Електронне видання

Відповідальний за випуск Г.І.Рашба

**Издания кафедры теоретической физики имени
академика И.М.Лифшица (вклад Ульяновых)**
К 200-летию Харьковского университета

Серия монографий и учебных пособий

1. В.В.Ульянов. ВСТУП ДО КВАНТОВОЇ КІНЕТИКИ. – 2004.
2. Ю.В.Василевская, В.В.Ульянов
НОВЫЕ КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ В
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ СПИНОВЫХ СИСТЕМ. – 2005.
3. Е.Н.Синельник, В.В.Ульянов
ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К ФИЗИКЕ(+CD). – 2005.
4. А.В.Лымарь, В.В.Ульянов. ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К
ФИЗИКЕ. Ч. 2 (+CD). – 2010.
5. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА НА ФИЗИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ
ХАРЬКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. Сост. В.В.Ульянов. – 2009.
6. В.В.Ульянов. О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ
ЧАСТИЦ В ПОЛЯХ С ОСОБЕННОСТЯМИ. – 2002.
- 7,8. В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов. КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВА-
НИЯ КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ. Ч. 1, 2 (+CD). – 2011, 2012.
- 9,10,11,12. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ. Ч. 1, 2, 3, 4. – 2002, 2011.
- 13,14. В.В.Ульянов. ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКЕ.
Ч. 1, 2. – 2011.
- 15,16. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ. Ч. 1, 2. Изд. 2-е, доп. – 2011.
17. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 1. – 2003.
18. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 2. – 2003.
19. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 3. – 2004.
20. В.В.Ульянов. СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ ПО
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ. Ч. 1. – 2011.
21. В.В.Ульянов. СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ ПО
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ. Ч. 2. – 2012.
22. А.М.Ермолаев, Н.В.Ульянов. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ
В НЕФЕРРОМАГНИТНЫХ ПРОВОДНИКАХ
С ПРИМЕСНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ЭЛЕКТРОНОВ. – 2006.
23. А.М.Ermolaev, N.V.Ulyanov. ELECTRON SPIN WAVES IN
NONMAGNETIC CONDUCTORS WITH RESONANCE STATES
OF ELECTRONS. – 2008.
24. О.М.Єрмолаєв, В.В.Ульянов. СТИСЛИЙ НАРИС ІСТОРІЇ
КАФЕДРИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМЕНІ АКАДЕМІКА
І.М.ЛІФШИЦЯ. – 2008.

200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний об ученых-физиках

1. В.В.Ульянов
ИЛЬЯ МИХАЙЛОВИЧ ЛИФШИЦ. – 2001,2007(+DVD).
2. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
МОИСЕЙ ИСААКОВИЧ КАГАНОВ. – 2001.
3. В.В.Ульянов. ЛЕВ ЭЛЕАЗАРОВИЧ ПАРГАМАНИК. – 2002.
4. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ЛЕОНИД СТЕПАНОВИЧ ГУЛИДА. – 2002.
5. В.В.Ульянов
БОРИС ИЕРЕМИЕВИЧ ВЕРКИН. – 2002.
6. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
АРНОЛЬД МАРКОВИЧ КОСЕВИЧ. – 2002.
7. В.В.Ульянов
ВИКТОР МОИСЕЕВИЧ ЦУКЕРНИК. – 2002.
8. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ВАЛЕНТИН ГРИГОРЬЕВИЧ ПЕСЧАНСКИЙ. 2002.
9. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ЭМАНУИЛ АЙЗИКОВИЧ КАНЕР. – 2002.
10. А.М.Ермолаев, Ю.П.Степановский, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР ИЛЬИЧ АХИЕЗЕР. – 2002.
11. В.В.Ульянов
АНДРЕЙ ВЛАДИМИРОВИЧ ЖЕЛЕХОВСКИЙ. – 2003.
12. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ВЛАДИМИР ПЕТРОВИЧ ГАЛАЙКО. – 2003.
13. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ИГОРЬ ИВАНОВИЧ ФАЛЬКО. – 2003.
14. Г.И.Рашба, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР МИХАЙЛОВИЧ ЕРМОЛАЕВ. –2003.
- 15.
16. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ОЛЕГ ИВАНОВИЧ ЛЮБИМОВ. – 2005.
17. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ. – 2008.
18. В.В.Ульянов. ВОСПОМИНАНИЯ ФИЗИКА-ТЕОРЕТИКА. Ч.1. – 2008.
19. В.В.Ульянов. К 95-ЛЕТИЮ Л.Э.ПАРГАМАНИКА. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ (2-е изд., доп.). – 2010.
21. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. М.И.КАГАНОВ В ХГУ. – 2011.
22. В.В.Ульянов. К 90-ЛЕТИЮ М.И.Каганова. – 2011 (CD).

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о Детях физмата

1. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ИВАНОВИЧ ШАРАПОВ. – 2002, 2007.
2. В.В.Ульянов. НА УНИВЕРСИТЕТСКОЙ. – 2002, 2007.
3. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ГАВРИЛОВИЧ КЛАДКОВОЙ (Мой друг Толька). – 2002, 2007(CD).
4. ЛЕГЕНДЫ И БЫЛИ СТАРОГО ФИЗМАТА
 - Ч.I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Дзюба А.С., Перваков В.А., Сизова З.И., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч. I I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С., Гапон Э.В, Иванов И.Г., Кондратьев Б.В., Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Хижковский В.П., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч. I I I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С., Козинец В.В., Кондратьев Б.В., Николаев Г.Т., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч.IV. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2002.
 - Ч.V. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Валиев Б.М., Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Сизова З.И., Ульянов В.В. - 2002.
 - Ч.VI. Сборник рассказов. Барьяхтар В.Г., Гребенник И.П., Креснин А.А., Манжелей В.Г., Пустовалов В.В., Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.VII. Сборник стихов. Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2003.
 - Ч.VIII. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Тартаковский В.К., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.IX. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003..
 - Ч.X. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Ульянов В.В., Хижковский В.П., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч.XI. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Кан Я.С., Николаев Г.Т., Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2003.
 - Ч.XII. Сборник рассказов. Боярский Л.А., Гребенник И.П., Малеев В.Я., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2004.
 - Ч.XIII. Сборник рассказов. Ковинько Н.М., Мазель Е.З., Ривкина Э.М., Розенберг В.Я., Тартаковский В.К., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2008.
 - Ч.XIV. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Евланов М.В., Кан Я.С., Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П., Таранова Г.М., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2009.
 - Ч.XV. Сборник рассказов. Креснин А.А., Ульянов В.В., Федченко Л.Ю., Хайтман Е.Н., Яровая Р.Г. - 2009.
 - Ч.XVI. Сборник рассказов. Рофе-Бекетов Ф.С., Татарченко Л.П., Ульянов В.В. – 2009.
5. В.В.Ульянов. КАК МЫ ПРАЗДНОВАЛИ 50-ЛЕТИЕ ОКОНЧАНИЯ УНИВЕРСИТЕТА (+CD). – 2007.

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о жизни в XX веке

1. В.В.Ульянов. Д О В О Й Н Ы (1934-1941). – 2002.
2. В.В.Ульянов. В О Е Н Н Ы Е Г О Д Ы (1941-1945). – 2002.
3. В.В.Ульянов. В Ш К О Л Е (1945-1952). – 2002.
4. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1934-1950). – 2003.
5. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1951-1954). – 2003.
6. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1955-1957). – 2003.
7. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1958-1961). – 2003.
8. В.В.Ульянов. Д В А Д Н Я В А Л У Ш Т Е. – 2003.
(Волейбольные грёзы)
9. В.В.Ульянов. Д В А Д Ц А Т Ы Й Д О М. – 2003.
10. В.В.Ульянов. 5 0 Л Е Т С П У С Т Я. – 2003.
11. В.А.Ульянов
ВОСПОМИНАНИЯ ДЕТСТВА И ЮНОСТИ. – 2003.
12. В.А.Ульянов. МОЯ ПОЕЗДКА В США И ОБРАТНО. – 2003.
13. В.А.Ульянов. С Т Р А Н И Ч К И Ж И З Н И. – 2003.
14. В.В.Ульянов
РОДОСЛОВНАЯ НАШЕЙ СЕМЬИ. – 2004.
15. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ. – 2004.
16. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1962-1967)+CD. – 2006.
17. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ(2-е изд., доп.). – 2007.
18. В.В.Ульянов. ВИКТОР ЕВГЕНЬЕВИЧ РУБАНИЧ(+CD). – 2008.
19. В.В.Ульянов. НОВОЕ О ПУШКИНЕ И ГОГОЛЕ. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ИЗДАНИЯ. ВЫСТАВКА КНИГ. – 2009 (CD).
21. Н.В. и И.П.Ульяновы. ЧЕРНОГОРИЯ. ИЮЛЬ 2009. – 2009 (CD).
22. Н.В.Ульянов, И.П.Ульянова. ПО ЮГУ ЕВРОПЫ. – 2009 (CD).
23. В.В.Ульянов. К 150-ЛЕТИЮ А.П.ЧЕХОВА. – 2010 (CD).
24. В.В.Ульянов. К 170-ЛЕТИЮ П.И.ЧАЙКОВСКОГО. – 2010 (CD).
25. Н.В. и И.П.Ульяновы. БОЛГАРИЯ И РУМЫНИЯ. – 2010 (CD).
26. В.В. и Н.В.Ульяновы. МИСХОР – АВГУСТ 2010. – 2010 (CD).
27. В.В.Ульянов. К 110-летию В.А.Ульянова. Рисунки отца. – 2011 (CD).
28. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ПАВЛОВИЧ ЗАВАЛИШИН. – 2011 (CD).
29. В.В.Ульянов
МОЯ МУЗЫКАЛЬНАЯ ИСТОРИЯ (+DVD). – 2011.
30. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1968-1973)+DVD. – 2011.

